

# **Anwendungsorientierte Erprobung und Weiterentwicklung numerischer Modelle zur Simulation von Strömungs- und Transportprozessen in granitoiden Gesteinen**

Von der  
Fakultät Architektur, Bauingenieurwesen und  
Umweltwissenschaften  
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina  
zu Braunschweig

zur Erlangung des Grades einer  
**Doktorin der Naturwissenschaften (Dr. rer. nat.)**  
genehmigte

## **Dissertation**

von  
Christine Fahrenholz  
geboren am 25.10.1972  
aus Hannover

Eingereicht am	30. September 2009
Disputation am	26. April 2010

Berichterstatter	Prof. Dr. Matthias Schöninger Prof. Dr. Wernt Brewitz
------------------	--

(2011)



# INSTITUT FÜR GEOÖKOLOGIE

Abteilung für Hydrologie und Landschaftsökologie

Prof. Hon. -Prof. Dr. rer. nat. Hans Matthias Schöniger



Braunschweig, 02.11.07

An die

Fakultät 3

- Architektur, Bauingenieurwesen und Umweltwissenschaften -

der Technischen Universität Carolo Wilhelmina

38106 Braunschweig

## Promotionsverfahren Christine Fahrenholz

### Befürwortung und Genehmigung

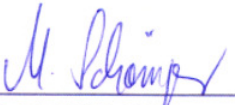
Hiermit unterstütze und genehmige ich als Mentor von Frau Christine Fahrenholz im Rahmen Ihrer Promotion die Vorveröffentlichung einiger Teilerkenntnisse und Ergebnisse aus Ihrer Doktorarbeit. Frau Fahrenholz publiziert in Autorenschaft mit unten aufgeführten Aufsatz in der IAH-SP (Intern. Association of Hydrology - Spec.-Press):

### **“Hydrogeologic Modelling with Regard to Site Selection for an Underground Repository in a Granite Formation in Krasnojask, Russia”**

C. Fahrenholz<sup>1</sup>, E. Fein<sup>1</sup>, W. Brewitz<sup>1</sup>, M. Schöniger<sup>2</sup>

<sup>1</sup>GRS, Final Repository Safety Research Division

<sup>2</sup>Technical University of Braunschweig, Institute of Geoecology

  
Prof. Dr. Matthias Schöniger





## Vorwort

Die nachfolgende Arbeit ist während meiner Beschäftigung bei der GRS mbH (Gesellschaft für Anlagen- und Reaktorsicherheit) in der Abteilung Sicherheitsanalysen des Fachbereichs Endlagersicherheitsforschung entstanden. Sie behandelt Detailfragen, welche im Rahmen des vom BMWi geförderten Forschungsvorhabens „ASTER“ (Anforderungen an eine Standorterkundung für HAW-Endlager in Hartgesteinen, 2002-2005) nicht abgedeckt werden konnten. Das Projekt war Teil der im Jahr 2001 zwischen dem Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie (BMWi) der Bundesrepublik Deutschland und dem Ministerium für Atomenergie (ROSATOM) der Russischen Föderation beschlossenen wissenschaftlich-technischen Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Endlagerforschung. Es wurde auf deutscher Seite in Zusammenarbeit mit der Deutschen Gesellschaft zum Bau und Betrieb von Endlagern und Abfallstoffen (DBE Tec) sowie der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR) und der für die Endlagerproblematik zuständigen russischen Behörde VNIPI Promtehnologii durchgeführt.

Gegenstand des Vorhabens war die von Russland geplante Endlagerung hochradioaktiver Abfälle in einem kristallinen Festgestein. Hierzu sollten die Anforderungen für die Standorterkundung ermittelt werden, um zu einem späteren Zeitpunkt einen Sicherheits- bzw. Standorteignungsnachweis führen zu können. Die Projektarbeit beinhaltete zudem den Austausch von Überlegungen und Erfahrungen in Bezug auf die Konzeption, Auslegung und Standortwahl eines potenziellen Endlagers.

Die Arbeiten wurden anhand von zwei Standorten durchgeführt, welche von den russischen Projektpartnern als mögliche Endlagerstandorte identifiziert worden waren: Einem Granitoid im Nishnekansker Massiv nahe der Stadt Krasnojarsk und einem Porphyry im Ural in der Nähe der Stadt Majak. Für Teilgebiete erfolgten eine dreidimensionale Nachbildung des Gesteinsaufbaus, technische Modellrechnungen im Hinblick auf das Grundwasserströmungsverhalten und eine mögliche Radionuklidausbreitung. Dabei wurde auf die Ergebnisse zahlreicher bereits durchgeführter Labor- und Felduntersuchungen in diesen Gebieten zurückgegriffen. Neue Daten wurden nicht erhoben.

Weil die firmeneigenen Programme der GRS (d<sup>3</sup>f bzw. r<sup>3</sup>t) erst nach den zur Zeit laufenden Projekten A-Dur (2008-2012) die Möglichkeit bieten werden, mehrdimensionale hydrogeologische Modellrechnungen in einem geklüfteten Gestein durchzuführen, wurde das kommerzielle Programmpaket FEFLOW 5.2/5.3 für die Modellarbeiten genutzt.

## Abstract

The presented study has been carried out against the background of problems and questions, which are discussed within long-term safety analysis with regard to the deposition of radionuclide waste within a deep repository in fractured rock.

The main research consists in the analysis of

- general transport processes within a fractured aquifer by means of 2d and 3d model calculations of different scales, with the objective of determining sensitive parameters,
- the influence of heat-fields, with regard to groundwater flow and mass transport within an fractured aquifer,
- the new modules of the FEFLOW 5.2 program version, called „Multi-Species Transport“ and „Discrete Feature Elements“ for the implementation of radionuclide decay chains, as well as the implementation of explicit fractures in local and regional scale.

Additionally it should be asked whether and to what extent the hydrogeological programme FEFLOW provides an opportunity to deliver additional information to the one-dimensional far-field CHETMAD module of the EMOS programme.

The models have been tested with increasing complexity as far as possible by using field data from the Itatskij investigation area in the Nishnekanskij Granitoidmassif, near the city of Krasnojarsk in Siberia.

The model results show that it is possible to demonstrate the general behaviour of flow and transport processes for different scales and dimensions by using the FEFLOW programme and to detect the essential parameters on the basis of simplified fracture systems. In addition to the Darcy velocity of the solid stone matrix, the various fractures and their characteristics, such as aperture, amount, connectivity and orientation, with regard to the flow-field, are the most important factors. The radionuclide transport also depends to a high degree on the solubility and sorption coefficients of radionuclides on the different rock components.

In addition it becomes obvious, that the heat-fields, independent of their occurrence as natural geothermal temperature gradient or artificial heat-field over a few hundred years generated by the radioactive decay of waste, have almost no consequences regarding groundwater flow and radionuclide transport within the fractured rock.

Furthermore, it is shown that the new programme modules are appropriate to implementing radionuclide decay chains and explicit fractures on a local and regional scale. It is important that there are restrictions for their implementation concerning the amount of fractures and their intersection angles due to the necessity to create as many equilateral grid elements as possible to ensure numerical stability, as well as the fact that fracture implementation in 3d is bound to the availability of geological borders in the form of model slices.

Unfortunately, it was not possible to reproduce a radionuclide transport calculation in detail, which was previously done with the „r<sup>3</sup>t“ programme. Although the principle transport phenomenon for the mother nuclide and its concentration are very similar between the different programme results, for the daughter nuclide there are differences in advanced calculation time. It is presumed, that the solution of the transport equation caused the different model results. However, only a detailed comparison between the mathematical implementation of the relevant equations should permit the differences.

The different key aspects of the hydrogeological model, compared to the typical one-dimensional models of long-term safety analysis, show important additional information. If adequate data is provided, then spacious hydrogeological model calculations can lead to a better understanding of the local and regional groundwater flow regime, a more realistic estimation of the transport path length, as well as flow volume. For this reason it provides a more reproducible description of the highly simplified fracture system in one-dimensional safety analysis.

Nevertheless, it should be kept in mind, that the models are only able to show one time and spacial realisation of a possible parameter set. Therefore, they can only clarify well defined flow and transport problems in detail. A stochastic parameter variation of rock characteristics, which is necessary for long-term safety analysis, can not be performed.





An dieser Stelle möchte ich mich bei all denen bedanken, die mich auf dem Weg dieser Arbeit durch Höhen und Tiefen begleitet haben.

Bei meinen Doktorvätern Prof. Matthias Schöniger und Prof. Wernt Brewitz möchte ich mich für die Vergabe dieser interessanten Aufgabenstellung und die stets offene Tür ihrer Büros bedanken. Sie unterstützten mich in jeglicher Hinsicht und waren über den gesamten Zeitraum mit Begeisterung dabei.

Bei meinem leider inzwischen verstorbenen Kollegen Eckhard Fein möchte ich mich für das gemeinsame Durchstehen des sich als äußerst schwierig gestaltenden Projektes bedanken, in die diese Arbeit eingebettet war. Auf seine ruhige und verständnisvolle, manchmal auch pragmatische Art hat er es immer wieder verstanden meinen Unmut im Zaum zu halten und mit einer Tasse Ostfriesentee zu besänftigen. Ihm und meinen Kollegen Svenja Vorlop und Dieter Buhmann sowie meinen ehemaligen Kollegen Sven Keesmann und Frau Berge gilt mein besonderer Dank für ihre Zusprache und ihr Mutmachen, insbesondere in der sich als sehr schwierig gestaltenden Endphase. Meinem Kollegen Johannes Droste und meiner ehemaligen Kommilitonin Johanna Jagelke danke ich für ihr stets offenes Ohr, ihre Hilfsbereitschaft und vielfältigen Fachdiskussionen.

Besonders viel hat es mir bedeutet, dass Herr Prof. Schöniger als Doktorvater, sowie mein Vorgesetzter Herr Doktor Jörg Mönig und auch Herr Steininger als Projektträger die Fertigstellung dieser Arbeit nie anzweifelten. Mehr noch: Sie machten mir immer wieder Mut wenn die Arbeit ins Stocken geriet oder ausgebremst wurde und brachten Verständnis für die Mehrbelastung sowie die Arbeitspausen auf, die durch Hochzeit, Haussanierung und Nachwuchs entstanden. Vielen Dank für das in mich gesetzte Vertrauen.

Meinem kleinen Sohn Yannis danke ich für seine Bereitschaft jederzeit andere Personen als Spielkamerad(inn)en zu akzeptieren. Omi, Opa und seinen beiden Adoptivtanten Brigitte Brenning und Gitta Matthis danke ich für die liebevolle Betreuung unseres kleinen Sonnenscheins, die mir wertvolle Stunden für die Fertigstellung der Arbeit bescherten. Meiner kleinen Tochter Insa danke ich für ihre stets fröhliche Art, ihr Schlafbedürfnis zur richtigen Zeit und ihre Ausdauer beim eigenständigen Spiel.

Mein spezieller Dank gilt meinen Eltern und meinem Mann für das gemeinsame Durchstehen und die seelische Unterstützung während dieser zum Teil recht aufreibenden Zeit. Mal wieder hat sich der Spruch bewährt: „Der Mensch wächst mit seinen Aufgaben.“ Was wäre ich nur ohne die Lebensweisheiten meines lieben Vaters.

Meiner Mutter schulde ich besonderen Dank für das unermüdliche Mitfiebern, die Übernahme jeglicher Gartenarbeiten und die unzähligen vorbeigebrachten Mittagessen und Obststeller. Meinem Mann danke ich für die selbstverständliche Übernahme häuslicher Pflichten, sein Verständnis für meine vielen Schlechte-Laune-Phasen, seine Vermittlerrolle zwischen störrischen Computern und einer verzweifelten Doktorandin und die Freistellung an unzähligen Abenden, Wochenenden und Urlaubstagen, an denen er mich an den Rechner abgeben musste. Vielen Dank Euch Dreien. Ich bin sehr froh, dass ich Euch habe.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Problemstellung, Zielsetzung und Methodisches Vorgehen	2
1.2. Gliederung der Arbeit	5
<b>2. Grundlagen der Strömungs- und Transportmodellierung in granitoiden Gesteinen</b>	<b>6</b>
2.1. Geologisches System	6
2.1.1. Entstehung und Vergesellschaftung granitoider Gesteine	6
2.1.2. Alteration granitoider Gesteine	9
2.2. Hydrogeologisches System	17
2.2.1. Grundwasserhydraulik in granitoiden Gesteinen	17
2.2.2. Abstraktion des hydrogeologischen Systems	22
2.3. Physikalische Beschreibung	25
2.3.1. Grundwasserströmung ohne Dichteanomalie	25
2.3.2. Stofftransport und Dichteströmung	32
2.4. Numerische Umsetzung	46
2.4.1. Netzgenerierung	47
2.4.2. Lösungsverfahren	48
2.4.3. Schrittweiten-Steuerung	48
2.4.4. Stabilitätskriterien	49
<b>3. Zusammenstellung und Beurteilung der Eingangsdaten für die Modellrechnungen</b>	<b>51</b>
3.1. Lage und Morphologie	52
3.2. Klimatische Bedingungen	53
3.3. Geologische Situation und Genese	57
3.4. Hydrologie und Hydrogeologie	63
3.5. Beurteilung der vorhandenen Daten	66
<b>4. Entwickelte Modelle und ihre Ergebnisse</b>	<b>67</b>
4.1. Vorstudie	68
4.2. Regionales 3d-Strömungsmodell	75
4.3. Lokales 2d Strömungs- und Transportmodell	82
4.3.1. Modellierung ohne Wärmegradient	83
4.3.2. Modellierung mit Wärmegradient	90
4.4. Radionuklidtransportmodell	98
4.4.1. Vergleichende Testrechnung	99
4.4.2. Rechnung im lokalen Maßstab	105
<b>5. Zusammenfassende Darstellung und Diskussion der Ergebnisse</b>	<b>107</b>
5.1. Erprobung der neuen Programmmodule	108
5.2. Detailfragen der Grundwasserhydraulik	110
5.3. Mögliche Unterstützung sicherheitsanalytischer Rechnungen	112
<b>6. Verzeichnisse</b>	<b>115</b>



## Liste der verwendeten Symbole

$A$	Messfläche	$[L^2]$
$2b$	Kluftöffnungsweite	$[L]$
$c$	Stoffkonzentration	$[M \cdot L^{-3}]$
$C$	Wärmekapazität	$[E \cdot \Theta^{-1} \cdot M^{-1}]$
$d$	Gesteinsmächtigkeit	$[L]$
$D$	Hydrodynamische Dispersion	$[L^2 \cdot T^{-1}]$
$D_d$	Mechanischer Dispersionskoeffizient	$[L^2 \cdot T^{-1}]$
$D_m$	Molekularer Diffusionskoeffizient	$[L^2 \cdot T^{-1}]$
$F$	Durchströmte Fläche	$[L^2]$
$g$	Erdbeschleunigung	$[L \cdot T^{-2}]$
$h_0$	Standrohrspiegelhöhe	$[L]$
$h_1 - h_2$	Standrohrspiegelhöhendifferenz	$[L]$
$J$	Hydraulischer Gradient	$[1]$
$k$	Massenkonstante der Spezies	$[1]$
$K$	Permeabilität	$[L^2]$
$\vec{K}_{Adv}$	Advektiver Massenstrom	$[M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}]$
$\vec{K}_{Diff}$	Diffusiver Massenstrom	$[M \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}]$
$\vec{K}_{Disp}$	Dispersiver Massenstrom	$[M \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}]$
$K_f$	Durchlässigkeitsbeiwert	$[L \cdot T^{-1}]$

$K_D$	Verteilungskoeffizient	$[L^3 \cdot M^{-1}]$
$l$	Fließlänge	$[L]$
$m_w$	Masse des Grundwassers	$[M]$
$m, n$	Spezies-Index	$[1]$
$n_{eff}$	Effektive Porosität	$[1]$
$N$	Anzahl der Spezies	$[1]$
$P$	Porositätsfaktor	$[1]$
$q$	Quellen-/Senkenterm	$[L^3 \cdot T^{-1}]$
$q_{con}$	Quellen-/Senkenterm in der „ <i>convective form</i> “	$[M \cdot L^{-3} \cdot T^{-1}]$
$q_{div}$	Quellen-/Senkenterm in der „ <i>divergence form</i> “	$[M \cdot L^{-3} \cdot T^{-1}]$
$Q_V$	Volumenstrom	$[L^3 \cdot T^{-1}]$
$Q_W$	Wärmemenge	$[E \cdot M^{-1}]$
$R$	Retardation	$[1]$
$R_k$	Reaktionsrate	$[M \cdot L^{-3} \cdot T^{-1}]$
$S_s$	Spezifischer Speicherkoeffizient	$[L^{-1}]$
$t$	Zeit	$[T]$
$\Delta t$	Zeitschritt	$[T]$
$T$	Temperatur	$[\Theta]$
$T_1 - T_2$	Temperaturdifferenz	$[\Theta]$
$\vec{v}$	Geschwindigkeitsfeld	$[L \cdot T^{-1}]$

$\vec{v}_a$	Abstandsgeschwindigkeit	$[L \cdot T^{-1}]$
$\vec{v}_f$	Filtergeschwindigkeit	$[L \cdot T^{-1}]$
$V$	Gesteinsvolumen	$[L^3]$
$\Delta z$	Räumliche Schrittweite	$[L]$
$\alpha$	Kompressibilität des Korngefüges	$[L^2 \cdot T^2 \cdot M^{-1} \cdot L^{-1}]$
$\beta$	Kompressibilität des Wassers	$[L^2 \cdot T^2 \cdot M^{-1} \cdot L^{-1}]$
$\lambda$	Zerfallskonstante	$[T^{-1}]$
$\lambda_w$	Wärmeleitfähigkeit	$[P \cdot L^{-1} \cdot \Theta^{-1} \cdot T^{-1}]$
$\rho_w$	Dichte des Grundwassers	$[M \cdot L^{-3}]$
$\rho_s$	Dichte des Gesteins	$[M \cdot L^{-3}]$
$\eta_w$	Dynamische Viskosität des Wassers	$[M \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}]$





# 1. Einleitung

Je nach Vorhandensein und Eignung werden als Wirtsgesteine für die Einlagerung radioaktiver Abfälle Tongesteine (z.B. Frankreich, Schweiz), Salze (z.B. Deutschland, USA), granitoide Gesteine (z.B. Schweden, Finnland) oder Tuffe (z.B. USA) ausgewählt. Einige Länder wie beispielsweise Frankreich, Schweiz und Schweden haben Untertagelabore eingerichtet, um im Rahmen nationaler und internationaler Forschungsprogramme potenzielle Endlagergebiete detailliert untersuchen und die möglichen Gefahren besser abschätzen, sie international diskutieren und ihnen optimal begegnen zu können. Das von einem Endlager ausgehende Gefährdungspotential für Mensch und Umwelt muss nach internationalem Verständnis im Rahmen einer Langzeitsicherheitsanalyse (LZSA) zwischen 10 000 Jahre und 1 Mio. Jahre in Form der resultierenden Strahlenexposition bestmöglich für verschiedene Störfallszenarien zeit- und ortsabhängig abgeschätzt werden. Das Ziel besteht in einer optimalen Auslegung der geotechnischen Barrieren sowie bestmöglicher Auswahl des Wirtsgesteins und seiner notwendigen Ausprägung, so dass die Ausbreitung der Radionuklide so weit verzögert wird, dass ein Schutz über diesen langen Zeitraum mit ausreichend hoher Wahrscheinlichkeit gewährleistet werden kann.

Bei der Vorhersage helfen neben der Auswertung natürlicher Analoga die Modellierung der Grundwasserströmung und des Radionuklidtransports. Ihr Ausbreitungspfad wird vom Endlager ausgehend bis in die Biosphäre verfolgt, um im Anschluss daran die von ihnen ausgehende Strahlenexposition berechnen zu können. Die Rechnungen werden in Nahfeld-, Fernfeld- und Biosphäre-Rechnungen unterteilt. Die Nahfeld-Rechnungen beinhalten diejenigen Prozesse, die zu einem Radionuklidaustrag aus dem Endlagersystem und seinen geotechnischen Barrieren, einschließlich der durch den Bau des Endlagers erzeugten Auflockerungszone EDZ („excavation disturbed zone“) führen können (z.B. Lösung), sowie solche, die eine Rückhaltung in diesem Teilbereich bewirken (z.B. Sorption). Die Fernfeld-Rechnung berücksichtigt die Strömungs- und Transportprozesse innerhalb des Wirtsgesteins und seinem Deckgebirges, während die Biosphäre-Rechnung die einzelnen Expositionspfade, die die Radionuklide auf ihrem Weg von der Geosphäre in den direkten Einflussbereich des Menschen zurücklegen, beinhalten.

In Abhängigkeit der physiko-chemischen Bedingungen, der wirkenden Retardationsmechanismen sowie der hydraulischen Eigenschaften des Gesteins werden die Radionuklide unterschiedlich weit und in verschieden hoher Konzentration transportiert und bewirken damit orts- und zeitabhängig unterschiedlich hohe Strahlenexpositionen. Eine Voraussetzung für die Einschätzung der Eignung eines granitoiden Gesteins als Endlagerstandort ist daher zum einen die Erfassung und Charakterisierung der Strömungspfade sowie die Vorhersage ihrer zeitlichen Veränderung. Zum anderen muss das Fernfeldmodell die Möglichkeit bieten, die komplexen Strukturen eines geklüfteten Gesteins wiederzugeben sowie die Strömungs- und Transportprozesse realitätsnah abzubilden.

### **1.1. Problemstellung, Zielsetzung und Methodisches Vorgehen**

Die Modellierung von Grundwasserströmungs- und Stofftransportprozessen in geklüfteten Gesteinen wird durch die schwere Erkundbarkeit von Festgesteinen zusammen mit der hohen räumlichen Variabilität ihrer hydrogeologischen Strukturen (Materialeigenschaften, Skalengrößen) stark erschwert. Hohe Modellunsicherheiten und unzuverlässige Prognosen können die Folge sein. Im Rahmen einer Langzeitsicherheitsanalyse kommt zudem noch die Unsicherheit über die Länge des zu betrachtenden Zeitraums hinzu, in denen die hydraulischen Strukturen in der Regel großen Veränderungen unterworfen sind.

Radionuklidtransportrechnungen in geklüfteten Gesteinen gehören zudem zu den komplexeren Modellrechnungen. Das bisher von der GRS mbH im Rahmen von LZSA eingesetzte Fernfeldprogramm für geklüftete Gesteine CHETMAD ermöglicht eindimensionale Strömungs- und Radionuklidtransportrechnungen unter Berücksichtigung von Radionuklidzerfallsreihen /LUE 96/, /STO 96/. Zusammen mit dem Statistikprogramm STATIST können für nahezu alle Eingabeparameter Wertebereichen vorgegeben werden, aus denen nach Stichprobenziehung Monte-Carlo-Simulationen erfolgen. Der Vorteil ist, dass sich nahezu alle Parameter innerhalb bestimmter Bandbreiten statistisch variieren lassen und sich das Ergebnis in Form einer Wahrscheinlichkeitsverteilung darstellen lässt. Da die Bearbeitung der Strömungsvorgänge eindimensional erfolgt, ist eine Vereinfachung des hydraulischen Systems notwendig. Es stellt sich daher die Frage, ob und inwieweit ein zusätzliches Programm mit anderer

Schwerpunktsetzung zu einer Verbesserung der eindimensionalen Modellannahmen führen kann. Die von der GRS eingesetzten mehrdimensionalen Programme  $d^3f$  und  $r^3t$  sind jedoch bisher auf die Berechnung in porösen Gesteinen begrenzt /FEI 04/. Das hydrogeologische Programm FEFLOW der Firma Wasy bietet mit der Programmversion 5.2 die Möglichkeit, die neuen Module der „Diskreten Elemente“ und des „Mehrkomponenten-Transports“ für die Eingabe Kluftstrukturen und den Transport von Radionukliden unter Berücksichtigung ihrer Zerfallsreihen zu nutzen und deren Leistungsfähigkeit zu testen. Die Auswahl des Programms erfolgte auf Grundlage der Aufgabenstellung und des hydrogeologischen Aufbaus des Modellgebiets. Vorausgesetzt wird

- eine Schnittstelle zu einem Geoinformationssystem (GIS) für die Vereinfachung der Übertragung räumlicher Daten,
- die Möglichkeit mehrdimensional zu rechnen und eine freie Grundwasseroberfläche nachzubilden,
- die Grundwasserströmung sowohl in Poren- als auch in Kluftgrundwasserleitern zu modellieren,
- die geologischen Schichten realitätsnah zu erfassen und das Trennfugensystem diskret abzubilden,
- eine elementabhängige Sorption zu berücksichtigen,
- eine durch Wärmefelder erzeugte dichteabhängige Strömung und den radioaktiven Zerfall in Form von Zerfallsreihen zu berechnen.

Mit den Modellrechnungen sollen zudem die wesentlichen Kennwerte für Strömung und Transport erfasst werden. Ziel dabei ist den Schwerpunkt einer Gebietserkundung im Vorfeld auf die wesentlichen Punkte zu konzentrieren, um Zeit und Kosten zu sparen und Modellunsicherheiten durch gezielte Parametereingabe zu verringern.

Das Projekt „ASTER“ ermöglicht es, die Modellrechnungen in einem bereits erkundeten Gebiet des Nishnekansker Granitoidmassivs nahe der Stadt Schelesnogorsk in Sibirien durchzuführen. Es befindet sich in der unmittelbaren Umgebung einer Wiederaufbereitungsanlage und wird für die Endlagerung verfestigter, wärmeerzeugender und hochradioaktiver Abfälle in Erwägung gezogen.

Der Schwerpunkt der Forschungsarbeit liegt somit in der Modellierung der Grundwasserströmung und des Tracer- und Radionuklidtransports eines exemplarischen granitoiden Gesteins. Die Durchführung der Modellarbeiten erfolgt unter Anwendung des Programmsystems FEFLOW 5.2/5.3 vor dem Hintergrund einer möglichen Endlagerung radioaktiver Abfälle. Dazu werden erste Annahmen für deren Einlagerung in einem neu zu errichtenden Bergwerk aus dem Projekt „ASTER“ übernommen.

Das Ziel besteht darin mit Hilfe rechnergestützter Verfahren einen Beitrag zu einem besseren Prozessverständnis der Grundwasserhydraulik in kristallinen Festgesteinen und damit gesicherteren Prognose des zeitlichen und räumlichen Ausbreitungsverhaltens von Radionukliden durch folgende Untersuchungen zu leisten:

- Gewinnung einer Vorstellung grundsätzlicher Mechanismen von Grundwasserströmungs- und Transportvorgängen in einem geklüfteten Grundwasserleiter sowie der Einschätzung der Relevanz einzelner Parameter in Modellansätzen unterschiedlichen Maßstabs durch Parametervariation.
- Untersuchung des möglichen Einflusses eines durch den geothermischen Tiefengradienten hervorgerufenen sowie durch den radioaktiven Zerfall zusätzlich auftretenden Wärmefelder auf die Grundwasserströmung und den Radionuklidtransport.
- Erprobung der Leistungsfähigkeit der neuen FEFLOW-Module der „Diskreten Elemente“ für die Einarbeitung von Kluftsystemen in Form diskreter Elemente verschiedener Dimensionalität im lokalen und regionalen Maßstab sowie des „Mehrkomponententransports“ für die Berechnung des Radionuklidtransports unter Berücksichtigung von Zerfallsreihen durch
  - Vergleich der Modellergebnisse einer zuvor mit dem Programm  $r^3t$  erfolgten Rechnung in einem porösen Gestein.
  - Untersuchung des Programmverhaltens während einer komplexen zweidimensionalen Radionuklidtransportrechnung.

Zudem sollen die gewonnenen Erkenntnisse genutzt werden, um eine mögliche Unterstützung des eindimensionalen sicherheitsanalytischen Programms CHETMAD sowie eine mögliche Vereinfachung der praktischen Erkundung eines Festgesteins zu diskutieren.

Nach Einarbeitung in die Thematik der Strömungs- und Transportvorgänge in Kluftgrundwasserleitern und der Möglichkeit der Modellierung dieser Prozesse wurde mit der Datenanalyse im Gebiet Itatskij begonnen. Als Datenbasis standen geomorphologische, geophysikalische und (hydro)geologische Informationen aus russischen Untersuchungen zur Verfügung. Auf der Grundlage der vorhandenen Daten erfolgte die Schematisierung des hydraulischen Systems in Form eines hydrogeologischen Strukturmodells. Dabei galt es die jeweiligen Modellgebiete sinnvoll abzugrenzen, und mit Parametern zu belegen, sowie Rand- und Anfangsbedingungen zu definieren. Für die Erarbeitung eines kalibrierten Modells stellte sich die Datenbasis als nicht ausreichend heraus. Vielfach mussten die Standortdaten durch Literaturdaten ergänzt werden. Die Ergebnisse wurden daher lediglich einer Plausibilitätsprüfung unterzogen. Die Modellierung erfolgte in mehreren aufeinander aufbauenden Teilschritten mit zunehmender Komplexität. Als Ergebnis wurden zum einen Strömungsgeschwindigkeiten in den unterschiedlichen Gesteinsstrukturen sowie die jeweilige zeit- und ortsabhängige Konzentrationsverteilung der transportierten Tracer, Radionuklide sowie der Wärme gewonnen. Abschließend erfolgten die Auswertung der Modellergebnisse und ihre Diskussion im Hinblick auf eine mögliche Unterstützung sicherheitsanalytischer Rechnungen.

## **1.2. Gliederung der Arbeit**

Die Arbeit gliedert sich in drei Themenbereiche:

Der erste enthält den theoretischen Teil und geht auf die Grundlagen, die zum Verständnis der Modellarbeiten notwendig sind ein. Zu den behandelten Themen gehören der geologische Aufbau und die hydrogeologischen Eigenschaften granitoider Gesteine, eine Beschreibung der in ihnen möglichen Grundwasserströmung und Wärme- bzw. Stofftransportprozesse sowie die numerische Umsetzung des hydraulischen Gesamtsystems.

Im zweiten Abschnitt wird das Untersuchungsgebiet vorgestellt, die Datenlage diskutiert sowie auf die Modellrechnungen und ihre Ergebnisse eingegangen.

Die Arbeit schließt mit einer Beschreibung der aufgetretenen Probleme, einer Zusammenfassung und Diskussion der Modellergebnisse sowie ihrer Diskussion über mögliche Schlussfolgerungen im Hinblick auf die Erstellung sicherheitsanalytischer Rechnungen ab.

## **2. Grundlagen der Strömungs- und Transport-modellierung in granitoiden Gesteinen**

Die Zuverlässigkeit der Modellergebnisse hängt zum einen von der Qualität der Nachbildung des strukturellen Gesteinsaufbaus und seiner hydraulischen Besonderheiten, zum anderen von der korrekten physikalischen Beschreibung der in ihnen stattfindenden Strömungs- und Transportprozesse sowie der Möglichkeit der numerischen Umsetzung des Gesamtproblems ab. Daher wird in den nachfolgenden beiden Kapiteln zunächst auf die Entstehung und Alteration der im Untersuchungsgebiet vorhandenen granitoiden Gesteinen eingegangen. Im Anschluss daran erfolgt eine physikalische Beschreibung der in ihnen stattfindenden Strömungs- und Transportprozesse sowie der Möglichkeit der numerischen Umsetzung des hydraulischen Problems. Diese Themen sind ausführlich z.B. in /REI 91/, /EIS 91/, /BEA 87/, /DEM 86/ oder /SCH 03/ nachzulesen.

### **2.1. Geologisches System**

#### **2.1.1. Entstehung und Vergesellschaftung granitoider Gesteine**

Granitoide Festgesteine gehören zu der Gruppe der Magmatite und sind häufig auf den Kontinenten vertreten. Sie bilden sich während der Abkühlung silikatischer Gesteinsschmelzen. Gemeinsam bilden sie etwa 70% bis 80% aller Tiefengesteinskörper (Plutonite). Diese kühlen in der Erdkruste in 2 km bis 6 km Tiefe sehr langsam (10 000 Jahre und länger) ab und bilden Gesteinskomplexe mit einer Ausdehnung von einem bis mehreren hundert Kilometern Durchmesser. Typische Erstarrungsformen sind in Abb. 1 schematisiert dargestellt. Im Untersuchungsgebiet ist ein Batholith ausgebildet, vgl. Kapitel 3.3..

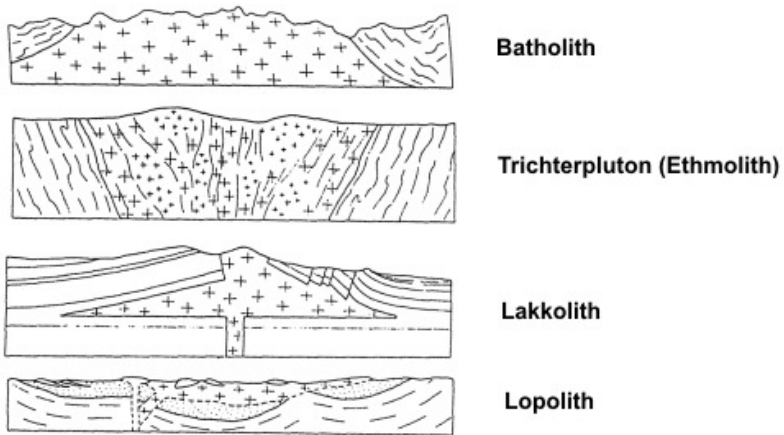


Abb. 1: Typische Erstarrungsformen der Plutonite /REI 91/

Als granitoide Gesteine werden Alkalifeldspatgranit, Granit, Granodiorit und Tonalit bezeichnet. Ihr richtungsloses massiges Korngefüge wird durch die Minerale Quarz, Alkalifeldspat, Plagioklas, Biotit, Muskovit und Amphibol gebildet, wobei je nach Gestein die Menge der Bestandteile, vor allem diejenigen von Alkalifeldspat und Plagioklas variiert, vgl. Abb. 3. Biotit und Muskovit treten in der Regel in Form dispers verteilter tafelförmiger Blättchen auf. Da Quarz zuletzt aus der Gesteinsschmelze ausgeschieden wird, bildet er meist die unregelmäßigen Zwickelfüllungen zwischen den anderen Gemengteilen aus.

Das Korngefüge weist eine mittel- bis grobkörniger Struktur mit Kristallgrößen zwischen 1 mm und 10 mm auf, vgl. Abb. 2. Die Kontaktbereiche zum Nebengestein sind in der Regel schneller abgekühlt und dadurch feinkörniger ausgebildet.

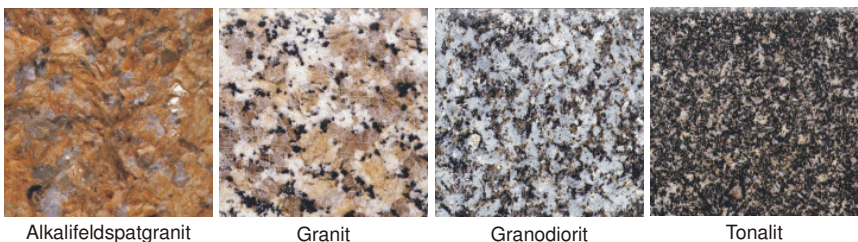


Abb. 2: Petrographische Zusammensetzung granitoider Gesteine /MAR 96/

Eine Untergliederung der Magmatite nach chemischen Gesichtspunkten erfolgte 1973 von der internationalen Nomenklaturkommission (IUGS) in Form eines Streckeisendiagramms, vgl. Abb. 3. Die Granitoide sind darin farbig unterlegt.

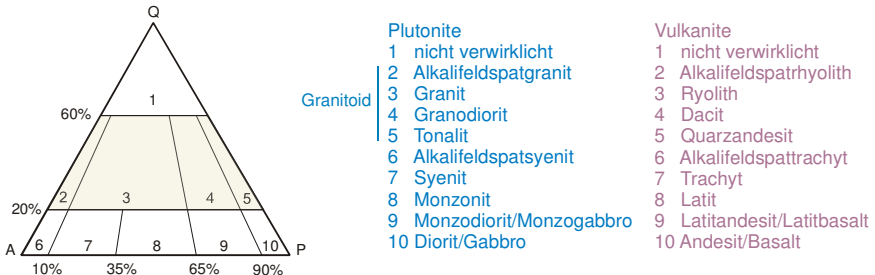


Abb. 3: Klassifikation der aus Alkalifeldspat, Plagioklas und Quarz zusammengesetzten magmatischen Gesteine /MAR 96/. Die Granitoide sind farbig unterlegt

Der Plutonit ist verschiedentlich von feinkörnigeren Gesteinen durchsetzt, die in offene Trennfugen oder auch Förderspalt von Vulkanen eingedrungen und schneller abgekühlt sind. Aufgrund ihrer meist steil stehenden, gangförmigen und bis zu mehrere Meter mächtigen Ausprägung werden sie als Ganggesteine bezeichnet, vgl. Abb. 4. Ganggesteine eines Granitoids sind häufig Granitporphyre, Pegmatite, Aplite oder Lamprophyre. Auch im Untersuchungsgebiet sind diese Gesteine vorhanden.



Andesitischer Gang  
im kanadischen Küstenpluton



Mafische Gangschar  
im Sinai

Abb. 4: Beispiele mafischer Ganggesteine /EIS 91/]



## 2.1.2. Alteration granitoider Gesteine

Die Granitoide gehören zu den gegenüber Verwitterungsprozessen sehr widerstandsfähigen Gesteinen /BLU 91/. Der Grund dafür ist zum einen ihr dichtes Korngefüge, zum anderen ihr hoher Anteil in Wasser nur schwer löslicher Silikate. Die Bildung von Trennfugensystemen sowie physikalische und chemische Verwitterungsprozesse führen über geologische Zeiträume dennoch zu ihrer Alteration. Diese kann wie im Untersuchungsgebiet aus einer Auflockerung des Gesteinsverbandes durch die Bildung von Trennfugensystemen oder auch zu einer Verdichtung durch partielle Mineralumbildungen führen.

### 2.1.2.1. Bildung von Trennfugensystemen

Die Alteration granitoider Gesteine kann durch die Bildung von Trennfugen zu einer verstärkten Auflockerung des ansonsten massiven Gesteins führen. Die Bildung und Ausprägung der Trennfugen in Form ihrer räumlichen Erstreckung bzw. Orientierung und inneren Struktur resultieren aus zeitlichen und räumlichen Spannungsänderungen und sind eng an die Art und Genese der Gesteine, ihre elastischen Eigenschaften sowie den Grad ihrer Beanspruchung gekoppelt. Meist sind Granitoide von komplizierten Trennfugensystemen durchsetzt. Als Beispiel dient ein Luftbild eines Granits in Wyoming (USA), in dem deutlich Trennfugensysteme unterschiedlicher Ausdehnung, Mächtigkeit und Orientierung zu erkennen sind, vgl. Abb. 5.

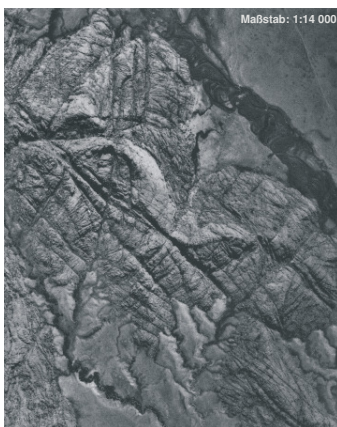


Abb. 5: Luftbild eines Granits in Wyoming (USA) /KRO 95/

Es wird zwischen endogenen bzw. primären Trennfugen und exogenen bzw. sekundären Trennfugen unterschieden. Als primäre Trennfugen werden solche bezeichnet, die sich in Folge thermischer Beanspruchung, wie z.B. durch eine Setzung in Folge von Gesteinsabkühlung oder eine Druckentlastung der Erdkruste durch Erosion entwickeln. Zu den sekundären Trennfugen gehören solche, die durch tektonische Bewegungen und der dadurch ausgelösten mechanischen Beanspruchung wie Dehnung (Dilatation) und Einengung (Extension) entstanden sind.

Abb. 6 zeigt das typische, **primär angelegte Trennfugensystem** in einem Plutonit, welcher wie im Untersuchungsgebiet als Gesteinsschmelze geschlossen aufgestiegen und langsam abgekühlt ist. Die Abkühlungsklüfte entstehen aufgrund des thermischen Gradienten, wenn hohe Temperaturunterschiede zwischen Rand und Innerem des Gesteins räumlich differenzierte Volumenverkleinerungen und Zugspannungen verursachen. Die in Folge des Abkühlungsprozesses angelegten Trennfugen bestehen aus mehr oder weniger oberflächenparallel verlaufenden flachen Horizontal- bzw. Lagerklüften L sowie den senkrecht dazu verlaufenden meist kürzeren Längs- S und Querklüften Q, die meist auch wesentlich geringere Öffnungsweiten besitzen /HOE 96/. Zusätzlich kommt es zu der Ausbildung von Diagonalklüften bzw. Streckflächen Str.fl. Im Fall gekrümmter Isothermen entwickeln sich entsprechend veränderte Trennfugen aus. Die Richtung der verschiedenen Trennfugen ist nicht nur makroskopisch, sondern auch latent in den kompakten Gesteinsblöcken enthalten und bildet natürlich vorgegebene Teilbarkeitsflächen.

In Folge erosiver Entlastung bilden sich zusätzliche oberflächenparallele Trennfugen bis in einige hundert Meter Tiefe aus, deren Trennflächen bei hohen Entlastungsraten relativ glatt ausgeprägt sind. Der Abstand dieser Trennfugen zueinander beträgt in Oberflächennähe 0,2 m bis 0,5 m nimmt jedoch schon wenige Meter tiefer auf 1 m bis 2 m zu /EIS 91/.

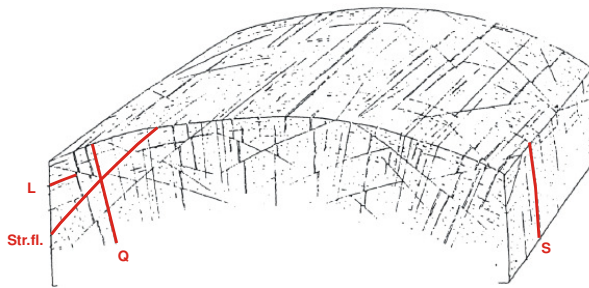


Abb. 6: Primär angelegtes Trennfugensystem in einem Plutonit /REI 91/

Als Folge tektonischer Bewegungen kommt es zu der **Ausbildung sekundärer Trennfugen**, wie z.B. Mikrorissen, Extensionsbrüchen, Störungs-, Scher- und Schieferungszonen.

Ein Extensionsbruch besteht aus zwei neuen Oberflächen, an denen keine signifikante Relativbewegung stattgefunden hat und daher kein oder ein nur minimaler Versatz besteht. Man unterscheidet zwei Arten von Extensionsbrüchen: Risse mit unebenen Bruchflächen und Klüfte mit relativ glatten Bruchflächen /EIS 91/.

Klüfte sind häufig als langgestreckte Trennfugen sichtbar. Sie gehen von Gesteinsheterogenitäten, wie z.B. Hohlräumen, härteren Mineralkörnern oder Mikrorissen aus, an denen sich besonders große Spannungen aufbauen. Ihre Ausbreitung erfolgt normal zur kleinsten Hauptspannung des Spannungsfeldes. Bei einer schnellen Ausbreitung bilden sich an lokalen Heterogenitäten Verzweigungen (Auffiederungen) oder es kommt zu abrupten Richtungsänderungen (Abwinkeln) der Bruchfront. Klüfte weisen große Unterschiede in ihrer Öffnungsweite und ihrem Abstand zueinander auf.

Störungen und Scherzonen sind dagegen durch einen deutlichen Gesteinsversatz gekennzeichnet.

Störungszonen können je nach Elastizität des Gesteins intensiv geklüftet oder feinkörnig zerbrochen (mylonitisiert) sein.

In Scherzonen ergeben sich im Verlauf der Deformationsgeschichte in Abhängigkeit der Größe der wirkenden Spannung innerhalb des Gesteinskörpers verschiedene Schermuster, vgl. Abb. 7. Die Relativbewegung erfolgt an einem System engständiger und zueinander parallel ausgebildeter Scherflächen, die während der Verformung in ihrer Orientierung konstant bleiben. Die Minerale werden während dieses Prozesses zerrieben, weshalb Scherzonen auch als kataklastische Zonen bezeichnet werden.

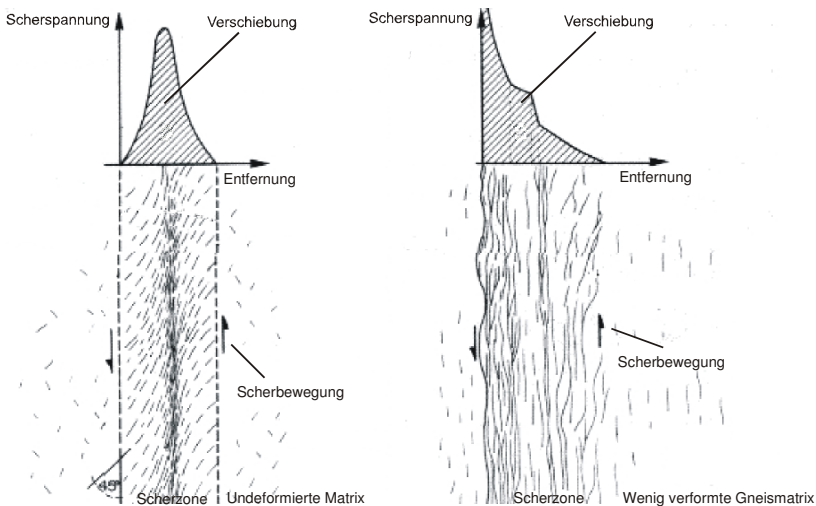


Abb. 7: Schermuster in Abhängigkeit der wirkenden Spannung /NAG 91/

Eine Schieferungszone beschreibt ein parallel ausgebildetes engständiges Trennflächengefüge, in dem Mineralumbildungen stattfinden, vgl. Abb. 8.

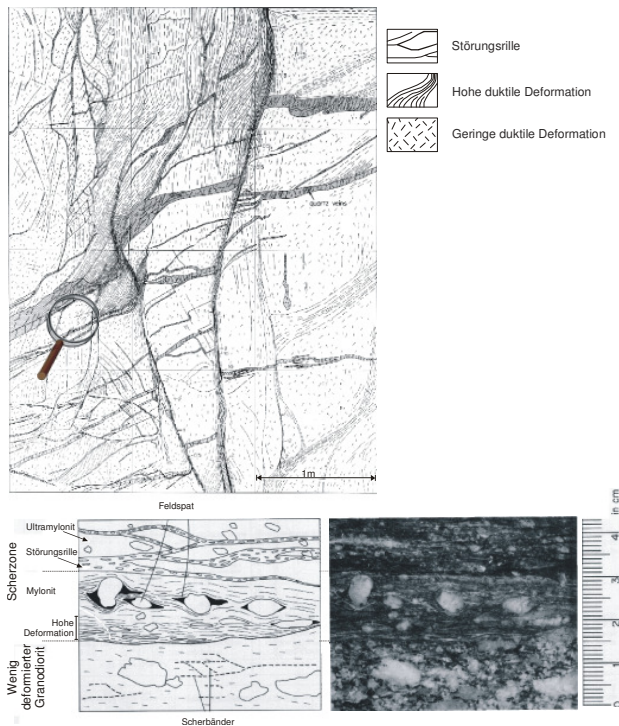


Abb. 8: Detailbetrachtung einer Schieferungszone /BOS 91/

Zu den typischen Gesteinen innerhalb von Störungs-, Scher- und Schieferungszonen gehören bei niedrigen Temperaturen ab 5 km Tiefe Kataklasite und Kakirite /MUR 83/, wobei

- der Kataklasit bei einem hohem Umgebungsdruck entsteht und einen festen Gesteinsverband besitzt. Die Ursprungsminerale können als größere Fragmente in eine feine Gesteinsmatrix eingebettet oder bis zur makroskopischen Unkenntlichkeit zerrieben (mylonitisiert) sein.
- ein Kakirit bei einem niedrigen Umgebungsdruck entsteht und keinen festen Gesteinsverband besitzt. Durch das intensive Zerreiben tritt er häufig in Form von Gesteinsmehl auf.

### 2.1.2.2. Verwitterungsprozesse

Aufgrund ihrer Widerstandsfähigkeit verwittern granitoide Gesteine vorwiegend durch physikalische Prozesse. Diese verursachen einen Kohäsionsverlust des Kornverbands und eine Fragmentierung des Gesteins.

Je nach Reliefenergie und Verwitterungsalter führt

- die Umwandlung der Silikate in Oberflächennähe zu der Bildung unterschiedlich tiefgründiger und verschieden dichter Verwitterungskrusten. Diese kann in geologischen Zeiten so tief abgetragen werden, dass sie schließlich als Depression im Gelände sichtbar wird. Verbleiben die festen Verwitterungsprodukte an dem Ort ihrer Entstehung, so bezeichnet man sie als Granitgrus (geolog.) oder Residualgestein (bodenkundl.). Die Tiefe der Vergrusung kann wenige Dezimeter bis mehrere Zehnermeter, im Fall des Untersuchungsgebietes sogar bis zu 150 m betragen, vgl. Kapitel 3.3.
- die Verwitterung entlang des regelmäßig ausgebildeten, primären Trennfugensystems zu einer Blockbildung und zu einer quaderförmigen Absonderung ganzer Gesteinsblöcke, welche als Wollsackverwitterung bezeichnet wird. Die Ausprägung dieser Formen hängt sowohl von der Trennfugendichte des Ausgangsgesteins, als auch von der Stärke der Erosionsprozesse ab /VOB 91/, vgl. Abb. 9. Werden die Restlingsformen instabil, degenerieren sie zu Blockmeeren und -streu.

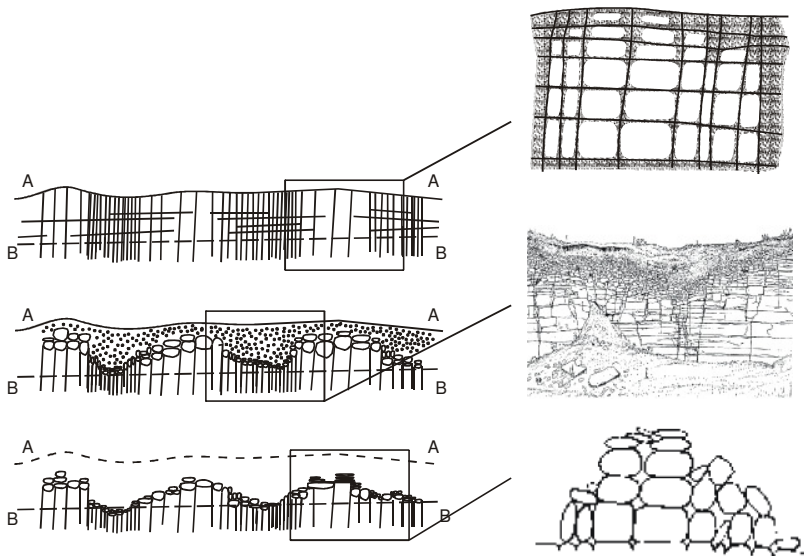


Abb. 9: Fortschreitende Verwitterung granitoider Gesteine /EXK 04/

Die Trennfugensysteme können jedoch auch bevorzugte Wasserwegsamkeiten darstellen, die im Laufe geologischer Zeiträume eine chemische Verwitterung begünstigen. So lassen sich die Plagioklase durch aufsteigende Tiefenwässer mit Temperaturen zwischen 150 °C und 350 °C leicht in Tonminerale umwandeln und sind daher sehr empfindliche Anzeiger hydrothermalen Aktivität. Durch die Einwirkung schwach säurehaltiger Wässer werden schließlich auch die nur schwer in Wasser löslichen Silikate allmählich zu neuen Mineralen, insbesondere Tone, umgewandelt /FRA 01/.

Mit einer Mineralumwandlung ist häufig eine Veränderung der Porosität verbunden. Stark umgewandelte Granitoide können absolute Porositäten bis zu 4% aufweisen und im Umfeld der Trennfugen bis in den Meterbereich nachgewiesen werden /TEC 85/. Die gegenüber der Porosität frischer Granitoide (0,2% bis 0,4%) stark erhöhten Werte lassen sich durch die Mikroporosität der gebildeten Tonminerale erklären. Mineralumbildungen können jedoch aufgrund einer durch Hydratation hervorgerufenen Volumenzunahme auch zu geringeren Porositäten führen. Für Granodiorite beträgt diese jedoch weniger als 1% /ZIE 04/.

In tektonisch intensiv beanspruchten Gesteinsbereichen sind Trennfugensysteme häufig vollständig mit Gesteinsabrieb verfüllt. Doch auch in tektonisch wenig überprägten Gesteinsbereichen kann es zu einer teilweisen oder sogar vollständigen Füllung der Trennfugenöffnungen durch die Ausfällung von Mineralsubstanz (Zementation) kommen, die jedoch in der Regel viel Zeit in Anspruch nimmt. Je nach Zusammensetzung der zirkulierenden Fluide, dem herrschenden Gesteinsdruck und der Temperatur bestehen die Klufthäute bzw. Kluftfüllungen z.B. aus Kalzit, Albit, Epidot, Chlorit oder Quarz, vgl. Abb. 10.



Abb. 10: Silifizierte Kluftwandung (NAGRA)



## 2.2. Hydrogeologisches System

### 2.2.1. Grundwasserhydraulik in granitoiden Gesteinen

Die hydraulischen Eigenschaften von Locker- und Festgesteinskörpern unterscheiden sich ganz wesentlich voneinander. Während sich das Grundwasser im Lockergestein in zusammenhängenden Poren zwischen den Einzelkörnern bewegt und der gesamte Porenraum nahezu gleichmäßig durchströmt wird, findet in der Gesteinsmatrix der Festgesteine nur eine sehr eingeschränkte Grundwasserströmung statt. Auch die Gesteinsmatrix des Nishnekansker Granitoids im Untersuchungsgebiet ist mit einem Durchlässigkeitsbeiwert von höchstens  $10^{-8}$  m/s nur sehr schwach durchlässig, vgl. Kapitel 3.4. Der Grund dafür ist das feine Intergranular des kristallinen Grundgebirges, welches ein weitgehend unverbundenen Porenraumsystem besitzt, so dass die adhäsiven Kräfte alleine unter dem Einfluss der Gravitation in der Regel kaum Fließbewegungen zulassen.

Dagegen ist der Anteil der Trennfugenporosität an der effektiven Porosität in der Regel sehr viel größer /BEA 93/. Es wird auch von der primären Matrix- und sekundären Trennfugenporosität gesprochen. Die Grundwasserströmung beschränkt sich daher im Wesentlichen auf hydraulisch aktive Trennfugen im ansonsten nur gering durchlässigen Gestein, weshalb Festgesteine auch als Kluftgrundwasserleiter (fractured aquifer) bezeichnet werden vgl. Abb.12.

Die Gebirgsdurchlässigkeit verschiedener Festgesteine ist daher direkt mit der Ausbildung der Trennfugensysteme und deren hydraulischer Wirksamkeit korreliert und umfasst in der Regel erhebliche Bandbreiten.

Diesen Zusammenhang verdeutlicht Abb. 11, die die anhand von 600 Gesteinsproben ermittelte Tiefenverteilung des Durchlässigkeitsbeiwertes im Schweizer Grimsel-Granit darstellt, sowie die in der Regel für alle Tiefenbereiche ähnlich große Bandbreiten und Mittelwerte /APP 01/. Von einer pauschalen Korrelation zwischen Trennfugendichte und Durchlässigkeitsbeiwert kann jedoch nicht ausgegangen werden, da sich z.B. ein frischer ungeklüfteter Granit in diesem Punkt kaum von einem hydrothermal umgewandelten, mit verheilten Trennfugen unterscheidet.

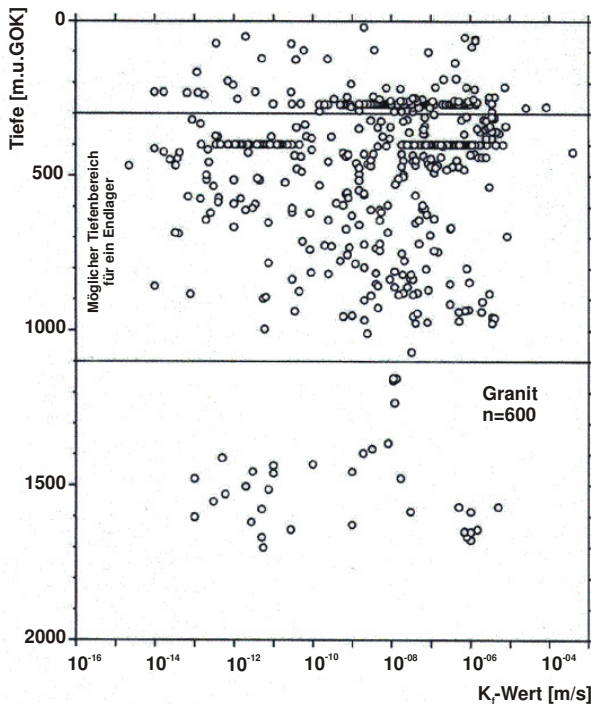


Abb. 11: Verteilung des Durchlässigkeitsbeiwertes im Schweizer Grimsel-Granit /APP 01/

Störungen und Scherzonen besitzen eine regionale Auswirkung auf die Grundwasserströmung, da sie sich über hundert bis tausend Meter Länge erstrecken. Trennfugen mit einer Größenordnung im Dezimeter- bis Meterbereich bestimmen hingegen das Strömungsverhalten auf lokaler, Mikrokluft von einigen Mikrometern bis Zentimetern Länge lediglich das auf kleinskaliger Ebene.

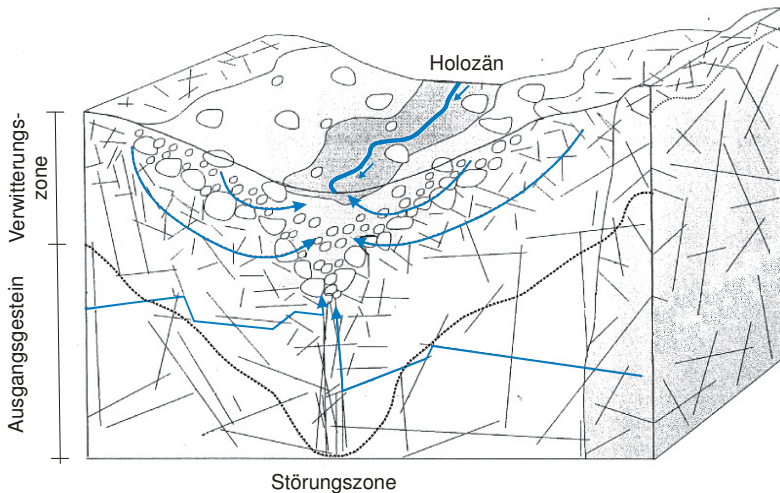


Abb. 12: Blockbild der Grundwasserströmung in einem Festgestein und seiner Verwitterungszone, dargestellt im Bereich einer holozänen Flussaue /POI 97/

Offene, unverfüllte Trennfugen stellen besonders bevorzugte Strömungs- und Transportwege dar und sind für hohe Fließraten und eine große Anzahl möglicher Fließpfade verantwortlich. Aufgrund der sich häufig erst im Laufe geologischer Zeiträume bildenden sekundären Verfüllung der Trennfugen, hängen ihre hydraulischen Eigenschaften entscheidend von dem Zeitpunkt ihrer Entstehung, ihrer weiteren Genese und den rezenten Spannungsverteilungen des Gesteins ab. Häufig sind nur die auf die jüngsten Deformationsereignisse zurückzuführenden Trennfugen stark wasserdurchlässig.

Laborversuche und In-Situ Beobachtungen verschiedener kristalliner Gesteine zeigen, dass sich das Wasser innerhalb einer Trennfuge entlang bestimmter Fließkanäle, sogenannter „channel“ bewegt und sich dabei auf nur etwa 5% bis maximal 20% der gesamten Trennfugenfläche verteilt /APP 01/. Zusammenhängende Fließpfade bilden eine durchgehende Wasserwegsamkeit, die als „Conductive Fracture System“ (CFS) bezeichnet wird, wobei etwa 40% bis 70% der Trennfugenflächen miteinander in Kontakt stehen /NAU 94/.

Trennfugen, die Öffnungsweiten von weniger als 8  $\mu\text{m}$  besitzen, können dabei kaum für die Wasserbewegung genutzt werden, da die Schichtdicke des elektrostatisch gebundenen Haftwassers bis zu 4  $\mu\text{m}$  beträgt /APP 01/.

Verschneidungsbereiche von Dehnungsklüften mit Scherzonen sind in der Regel besonders stark wasserführend /BOE 87/. Durch fluoreszenzmikroskopische Untersuchungen an Bohrkernen des Schweizer Grimsel-Granits wurde die Grundwasserströmung u.a. in Scherzonen untersucht. Es zeigte sich, dass diese durch Störungsrrillen, sogenannte „fault gouges“ dominiert wird, welche im Zuge der spröden Deformation entstanden sind. Diese sind nicht zementiert, hochporös, miteinander verbunden, einige Millimeter breit und von dichtem mylonitischen Material umgeben. Die wenigen Fließpfade innerhalb der Mylonitzone lassen sich auf parallel zu den Glimmerplättchen ausgebildete Trennfugen zurückführen. Der sich anschließende Granitoid besitzt zwar ein gut verbundenes Porennetzwerk, jedoch beträgt dessen Öffnungsweite nur etwa 1  $\mu\text{m}$ . Die Poren in der Mylonitzone und dem Granitoid tragen aufgrund ihrer geringen Öffnungsweiten von wenigen Mikrometern daher ausschließlich durch Diffusion zum Transportprozess bei. Die Störungsrrillen sind somit die einzige Struktur, in denen ein advektiver Transport stattfinden kann, vgl. Abb. 13.

Ausserhalb der Scherzonen stellte sich heraus, dass die Wasserführung zu 25 % bis 55 % an offene Trennfugen in pegmatisch-aplitischen Ganggesteinen zurückzuführen ist. Grund dafür ist die Tatsache, dass eine hydrothermale Verheilung der Trennfugen mit Tonmineralen und Calcit aufgrund der mineralogischen Zusammensetzung der Ganggesteine kaum stattfindet. Ansonsten ist die Wasserführung an unvollständig mit Quarz verheilte Trennfugen gebunden, die bevorzugt in kakiritischen Störungszonen auftreten.

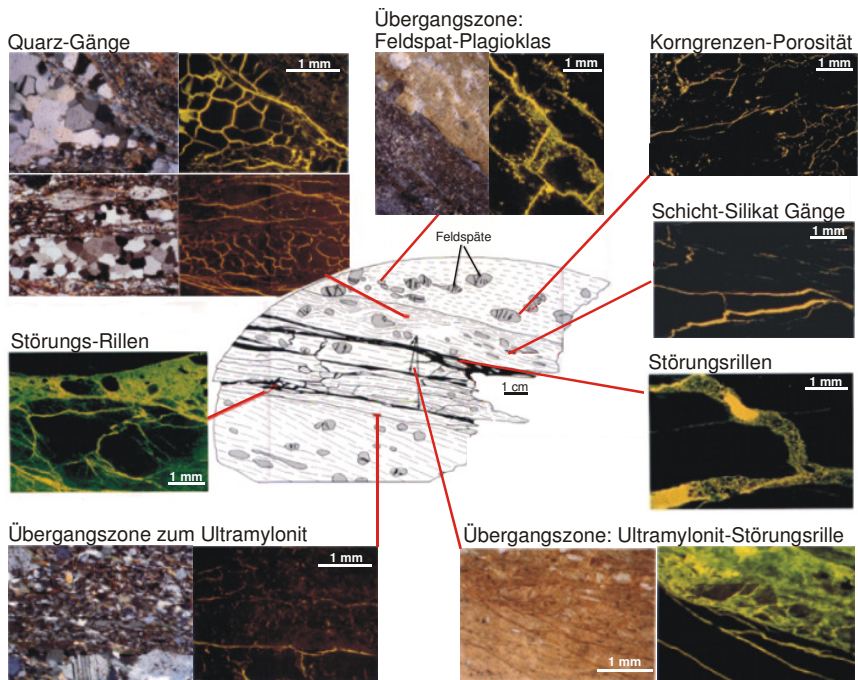


Abb. 13: Mit Fluoreszenzmikroskopie dargestellte Grundwasserströmung in verschiedenen Teilbereichen einer Scherzone, s. Bildmitte /BOS 91/

Im Untersuchungsgebiet des Nishnekansker Massivs sind vor allem die Störungszonen aufgrund ihres zusammenhängenden, gitterartigen Hohlräumssystems stark wasserdurchlässig. Einzelne Klüfte sind häufig durch Mylonitisierung, die Bildung plastisch reagierender Tonminerale oder sekundäre Mineralausscheidungen im Laufe der Zeit hydraulisch bedeutungslos geworden.

## 2.2.2. Abstraktion des hydrogeologischen Systems

Die Beschreibung eines geklüfteten kristallinen Festgesteins erfolgt durch die meist sehr kompakt aufgebaute Gesteinsmatrix und ihre Trennfugen, vgl. Kapitel 2.2.1. Die beiden Systeme unterscheiden sich hydraulisch insbesondere hinsichtlich der Art und Geschwindigkeit des Grundwasserflusses, seiner Speicherung, sowie der Diffusion und Rediffusion wasserlöslicher Stoffe. In der Regel kann sich das Grundwasser innerhalb der dichten Gesteinsmatrix wie sie auch im Untersuchungsgebiet ausgeprägt ist, nur diffusiv fortbewegen, während in den offenen Klüften die schnelle advective Strömung vorherrscht. Die Diffusion gelöster Bestandteile aus dem Kluftgrundwasser in die Gesteinsmatrix und Rediffusion ist daher stark eingeschränkt.

In den nachfolgenden Modellrechnungen wird das Gestein daher in genau diese zwei Komponenten zerlegt, vgl. Abb. 14. Ziel dabei ist es, hydraulisch relevante Trennfugensysteme und ihre strömungs- und transportrelevanten Eigenschaften zu erfassen, um die herrschende Grundwasserströmung beschreiben zu können. Die Gesteinsmatrix wird in den nachfolgenden Modellrechnungen jedoch nicht wie häufig üblich als undurchlässig angenommen sondern mit einem Durchlässigkeitsbeiwert belegt, vgl. Kapitel 4.

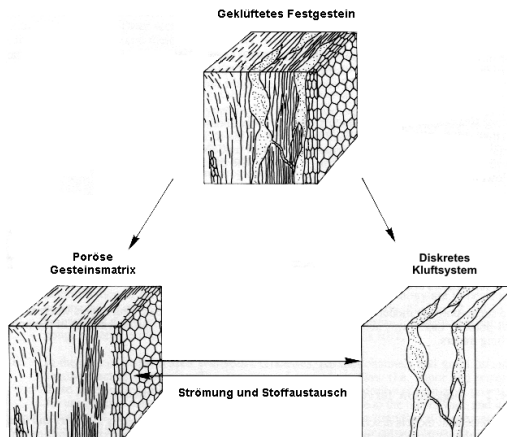


Abb. 14: Für die Modellbildung abstrahierte Komponenten des kristallinen Festgesteins /BOS 91/. Oben das zu modellierende Gestein, unten die zu abtrahierenden Gesteinskomponenten.

Die komplexe Ausprägung der Trennfugensysteme, wie z.B. Auffiederungen, Tortuositäten, blind auslaufende Trennfugen etc., kann aufgrund der eingeschränkten Erkundungsmöglichkeit von Festgesteinen sowie modelltechnischer Einschränkungen nicht detailgetreu wiedergegeben werden. Zudem handelt es sich bei der modelltechnischen Aufnahme der Trennfugensysteme lediglich um eine Momentaufnahme ihrer zur Zeit wirksamen hydraulischen Funktion innerhalb des Gesamtsystems.

In der Modellentwicklung ist es daher üblich, die unterschiedlichen Trennfugen und Gesteinsinhomogenitäten unabhängig von ihrer Genese vereinfacht als Klüfte zu betrachten. Eine hohe Kluftanzahl wie sie z.B. in Störungszonen auftritt wird entweder durch die explizite Aufnahme ihrer einzelnen Klüfte und derer hydraulischen Eigenschaften oder insgesamt als Zone einer gemittelten höheren Durchlässigkeit wiedergegeben, vgl. Kapitel 4. Der so auf seine hydraulisch wirksamen Strukturen hin abstrahierte Gesteinsaufbau stellt als hydrogeologisches Strukturmodell die Grundlage späterer Strömungs- und Transportmodellierungen dar und ist für deren Qualität von entscheidender Bedeutung.

Die Generierung der Klüfte kann auf deterministische oder stochastische Art erfolgen. Die deterministisch erzeugten Klüfte basieren auf tatsächlichen Messungen und Erkundungsarbeiten, stochastisch generierte Kluftsysteme dagegen auf statistischen Auswertungen, der die Klüfte beschreibenden Parameter /ZIM 07/. Beide Techniken bergen hohe Unsicherheiten. Vor allem die Richtigkeit von stochastisch generierten Kluftsystemen ist aufgrund ihrer meist hohen Anzahl schwer zu verifizieren. Wie sehr die stochastisch erzeugten Klüfte von der Realität abweichen und damit eine völlig andere Grundwasserströmung zur Folge haben können, zeigt Abb. 15. Trotz gleicher Kluftanzahl, -dichte und mittlerer Länge besitzen die Klüfte in der Realität (A) eine weitaus höhere Kluftkonnektivität als in dem stochastisch generierten Kluftsystem (B), wodurch erheblich mehr Klüfte in den Strömungsprozess eingebunden sind.

Das Programm FEFLOW ermöglicht ausschließlich die Generierung deterministisch angelegter Klüfte, vgl. Kapitel 2.4.1.

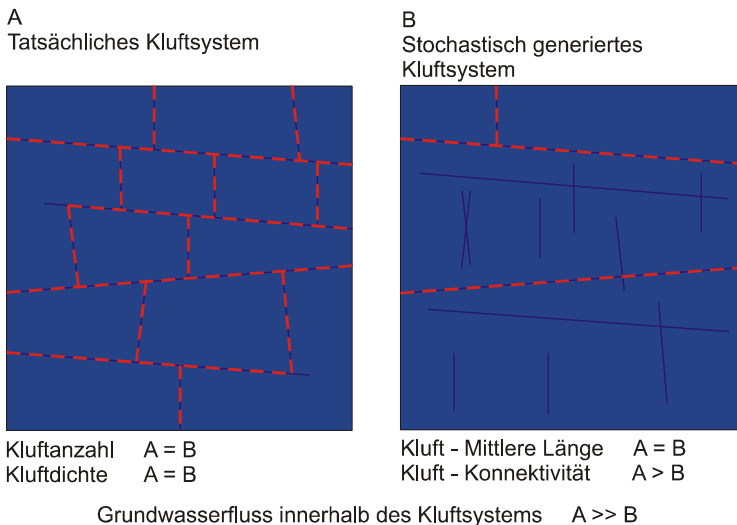


Abb. 15: Gegenüberstellung stochastisch generierter Kluftsysteme (rechts) mit den tatsächlichen Verhältnissen (links) (vorgestellt 2007 von J. W. Cosgrove, /WWW 07/)



## 2.3. Physikalische Beschreibung

### 2.3.1. Grundwasserströmung ohne Dichteanomalie

Grundwasserströmungsmodelle basieren auf physikalischen Gesetzen aus der Hydromechanik, Massenerhaltung und Impulsbilanz. Die daraus hergeleiteten Bewegungs-, Bilanz- und Strömungsgleichungen werden als Grundgleichungen der Grundwasserhydraulik bezeichnet.

Die Bewegungsgleichung beschreibt die Grundwasserströmungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit des Gesteins. Ihre häufigste und bekannteste Form ist die Darcy-Gleichung. Sie beschreibt die Grundwasserströmung in einem Gestein und somit den Zusammenhang zwischen Fließgeschwindigkeit, Boden- und Fluidkenngrößen sowie dem hydraulischen Gefälle, vgl. Gleichung (1).

$$Q_v = -K_f \cdot F \cdot \left( \frac{h_1 - h_2}{l} \right) \quad (1)$$

mit

- $Q_v$       Volumenstrom ( $L^3 \cdot T^{-1}$ )
- $F$         Durchströmte Fläche ( $L^2$ )
- $K_f$       Durchlässigkeitsbeiwert ( $L \cdot T^{-1}$ )
- $h_1 - h_2$    Standrohrspiegelhöhendifferenz (L)
- $l$         Fließlänge (L)

Durch Einsetzen der Beziehungen

$$J = \frac{h_1 - h_2}{l} \quad \text{und} \quad \frac{r}{v_f} = \frac{Q_v}{F} \quad (2)$$

ergibt sich die Darcy-Gleichung in der Form:

$$\vec{v}_f = -K_f \cdot J \quad (3)$$

mit

$J$       Hydraulischer Gradient (1)

$\vec{v}_f$       Filtergeschwindigkeit ( $L \cdot T^{-1}$ )

In den Modellen wird die Grundwasserströmung mehrdimensional betrachtet, vgl. Kapitel 4:

$$\vec{v}_f = -K_f \cdot \nabla J \quad (4)$$

mit

$$\vec{v}_f = \begin{bmatrix} v_x \\ v_y \\ v_z \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \nabla J = \left[ \frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial J}{\partial y} + \frac{\partial J}{\partial z} \right]^T$$

Der Durchlässigkeitsbeiwert  $K_f$  ist eine fluidabhängige Größe und ein Maß für die Reibung des Grundwassers beim Durchfließen des Gesteins, vgl. Gleichung (5):

$$K_f = \frac{\rho_w \cdot g \cdot K}{\eta_w} \quad (5)$$

mit

$\rho_w$       Dichte des Wassers ( $M \cdot L^{-3}$ )

$g$       Erdbeschleunigung ( $L \cdot T^{-2}$ )

$K$       Permeabilität ( $L^2$ )

$\eta_w$       Dynamische Viskosität des Wassers ( $M \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}$ )

Ist der Durchlässigkeitsbeiwert  $K_f$  des durchströmten Mediums nicht in allen Raumrichtungen gleich groß ergibt er sich zu:

$$K_f = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{bmatrix} \quad (6)$$

Das Gestein wird dann als anisotrop bezeichnet.

Die Permeabilität  $K$  beschreibt den Widerstand, den das Gestein der Fluidbewegung entgegensetzt und ist daher, im Gegensatz zum Durchlässigkeitsbeiwert eine fluidunabhängige Größe.

Voraussetzung für die Anwendung des Darcy-Gesetzes ist ein laminarer Grundwasserfluss, zu vernachlässigende Trägheitskräfte, sowie das Fehlen von Wechselwirkungen zwischen Grundwasser und Gesteinsmatrix. Das Darcy-Gesetz ist daher vor allem für poröse Grundwasserleiter, in denen es nur zu geringen Geschwindigkeitsänderungen innerhalb der Poren kommt, gültig.

Gilt kein linearer Zusammenhang zwischen Filtergeschwindigkeit und Druckgefälle, weil z.B. die Trägheitskräfte nicht vernachlässigt werden können, verliert das Darcy-Gesetz seine Gültigkeit. Dies geschieht, wenn die laminare Strömung in ein turbulentes Fließen übergeht oder die Wirkung der Haftkräfte, aufgrund einer sehr geringen Gesteinsdurchlässigkeit, eines geringen hydraulischen Gradienten oder eines kleinen Strömungsquerschnittes an Bedeutung gewinnt /DAV 97/.

Für die erstellten Modellrechnungen in dem geklüfteten kristallinen Festgestein wird das Darcy-Gesetz daher unter folgenden Annahmen angewendet:

- Die Klüfte bestehen aus stückweise ebenen, zueinander parallelen Oberflächen mit gleichmäßiger Öffnungsweiten und somit glatten Klüftwandungen.
- Innerhalb der Klüfte findet eine laminare Strömung eines inkompressiblen, viskosen Fluids statt.
- Über die gesamte Öffnungsweite der Klüfte herrscht ein konstanter Druck.

Permeabilität und Durchlässigkeitsbeiwert werden dann wie folgt angepasst:

$$-K_f = \frac{\rho_w \cdot g \cdot K}{\eta_w} \quad \text{und} \quad K = \frac{(2b)^2}{12}$$

mit

$2b$  Öffnungsweite der Trennfuge (L)

Das veränderte Darcy-Gesetz wird als „cubic law“ bezeichnet und ergibt sich zu:

$$\text{cubic law:} \quad Q_v = \frac{(2b)^2 \cdot \rho_w \cdot g}{12\eta_w} \cdot F \cdot J \quad (7)$$

Als Geschwindigkeitsprofil bildet sich innerhalb der Klüfte ein Paraboloid aus, vgl. Abb. 16.

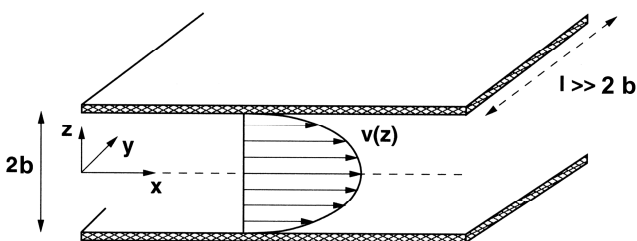


Abb. 16: Laminare Kluftströmung nach Hagen-Poiseuille /SIL 02/

Die Bilanzgleichung nimmt eine quantitative Beschreibung des Grundwasserflusses vor und basiert auf dem Gesetz der Massenerhaltung. Es entspricht der Wasserbilanz und beschreibt den Zu- und Abfluss des Grundwassers innerhalb eines Volumenelements einschließlich seiner Quellen und Senken. Die Masseninhaltsänderung ergibt sich für jedes Volumenelement aus der Summe der erfolgenden Massenein- und austräge, vgl. Gleichung 8.

$$\frac{\partial m_w}{\partial t} = \Sigma \rho_w \cdot Q_v + \Sigma \rho_w \cdot q \quad (8)$$

mit

$m_w$	Masse des Grundwassers (M)
$\rho_w$	Dichte des Grundwassers (M·L <sup>-3</sup> )
$Q_v$	Volumenstrom (L <sup>3</sup> ·T <sup>-1</sup> )
$q$	Quellen-/Senkenterm (L <sup>3</sup> ·T <sup>-1</sup> )

Die Wasserinhaltsänderung eines Volumenelementes äußert sich in der zeitlichen Änderung der an den Knoten eines jeden Elements berechneten Standrohrspiegelhöhe  $h_0$  und lässt sich beschreiben als:

$$\frac{\partial m_w}{\partial t} = \Sigma \rho_w \cdot Q_v + \Sigma \rho_w \cdot q \quad (9)$$

$$= \frac{\partial h_0}{\partial t} \rho_w \cdot S_s \cdot V$$

mit

$h_0$	Standrohrspiegelhöhe (L)
$S_s$	Spezifischer Speicherkoeffizient (L <sup>-1</sup> )
$V$	Gesteinsvolumen (L <sup>3</sup> )

Der spezifische Speicherkoeffizient  $S_s$  entspricht dabei der Änderung des Wasservolumens in einem Volumenelement bei Änderung der Standrohrspiegelhöhe um einen Meter. Liegt eine feste obere Begrenzung des wassererfüllten Raumes durch einen Grundwassergering- oder nichtleiter vor und somit ein gespanntes Grundwasser, so hängt der Speicherkoeffizient von der Kompressibilität des Wassers und der Elastizität des Gesteins ab, vgl. Gleichung 10:

$$S_s = \rho_w \cdot g \cdot (\alpha + \beta \cdot n_{eff}) \quad (10)$$

mit

$\alpha$  Kompressibilität des Korngefüges ( $L^2 \cdot T^2 \cdot M^{-1} \cdot L^{-1}$ )

$\beta$  Kompressibilität des Wassers ( $L^2 \cdot T^2 \cdot M^{-1} \cdot L^{-1}$ )

$n_{eff}$  Effektive Porosität (1)

Bei einem freien Grundwasserspiegel ist keine begrenzende Grundwasserdeckschicht in Form eines Gering- oder Nichtleiters ausgebildet, wie es bei freiem Grundwasser der Fall ist, so ist es notwendig, die Grundwasserspiegelhöhe und das sich ändernde Volumen des wassergesättigten Bereiches mit zu berücksichtigen. Die Speicherkapazität entspricht dann in etwa dem nutzbaren Porenraum.

Auf Basis der Bewegungs- und Bilanzgleichung ergibt sich die Grundwasserströmungsgleichung. Für die dreidimensionale, gesättigte und dichteunabhängige Grundwasserströmung gilt /LEG 96/:

$$S_s \frac{\partial h_0}{\partial t} = \operatorname{div}(K_f \cdot \nabla J) + q \quad (11)$$

$$= \frac{\partial}{\partial x} \cdot \left( K_x \cdot \frac{\partial J}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \cdot \left( K_y \cdot \frac{\partial J}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \cdot \left( K_z \cdot \frac{\partial J}{\partial z} \right) + q$$

Die Strömungsgleichung wird im Programmsystem FEFLOW numerisch gelöst. Das Ergebnis ist eine Näherungslösung, die als konsistent mit der exakten Lösung bezeichnet wird, wenn die numerische Lösung für beliebig kleine Orts- und Zeitschritte mit der analytischen übereinstimmt. Da es sich bei der Strömungsgleichung um eine partielle Differenzialgleichung zweiter Ordnung handelt, in denen die unbekannten Standrohrspiegelhöhen sowohl zeit- als auch ortabhängig sind  $[h(x,y,z,t)]$ , erfordern ihre spezielle Lösung die Definition von Anfangs- und Randbedingungen sowie eine Parameterbelegung. Die Anfangsbedingung besteht aus der Angabe einer Funktion der räumlich variierenden Standrohrspiegelhöhen zum Anfangszeitpunkt  $t_0$ . Die Randbedingung grenzt das Modellgebiet entsprechend seiner hydraulischen Eigenschaften gegen den ihn umgebenden Raum ab. Bei instationären Prozessen ist er zeitabhängig zu belegen. Die Parameter von Gesteins und Fluid komplettieren die Gleichung.

### 2.3.2. Stofftransport und Dichteströmung

Gegenstand der Transportrechnungen in Kapitel 4 ist zum einen der Tracer- bzw. Radionuklidtransport innerhalb eines geklüfteten kristallinen Festgesteins, zum anderen die Ausbreitung der durch den Zerfall der eingelagerten Radionuklide entstehenden Wärme. Die Grundwasserströmung und der Stoff- bzw. Wärmetransport im Grundwasser sind dabei gekoppelte Vorgänge. Da die Klüftstrukturen in der Regel eine höhere Durchlässigkeit besitzen als die Gesteinsmatrix (vgl. Kap. 2.2.1), findet der Transport dort in der Regel auch erheblich schneller statt. Ausgleichende Dichteströmungen werden innerhalb eines Grundwasserkörpers aufgrund unterschiedlicher Temperaturen, Salinitäten oder Drücke hervorgerufen, wobei ihre Ausprägung Einfluss auf die Kompressibilität, Viskosität, Wärmekapazität und –leitfähigkeit sowie Diffusivität des Grundwassers nehmen kann. Ausführlich lässt sich diese Thematik z.B. in /BEA 99/ nachlesen. Im Folgenden wird kurz näher auf die verschiedenen Transportprozesse eingegangen.

#### 2.3.2.1. Stofftransportprozesse

Wasser ist aufgrund seiner Polarität und hohen Dielektrizitätskonstante für viele Stoffe ein besonders gutes Lösungsmittel. Auch die in der Abfallmatrix zunächst gebundenen und in dem Abfallbehälter verwahrten Radionuklide werden im Laufe der Zeit durch das Grundwasser freigesetzt und abtransportiert.

Es wird zwischen reaktiven und nicht-reaktiven Transportprozessen unterschieden. **Nicht-reaktive Transportprozesse** unterliegen dabei lediglich den physikalischen Prozessen der Advektion, Dispersion, Diffusion und Adsorption.

- Die Advektion führt mit der vorhandenen Abstandsgeschwindigkeit zu einer Tracer- und Radionuklidausbreitung.
- Die mechanische Dispersion und molekulare Diffusion führen zu einer Vermischung und Ausbreitung des Tracers und der Radionuklide im Strömungsfeld und damit zu ihrer Verdünnung.
- die Adsorption der Radionuklide an Gesteinskomponenten verringert oder verlangsamt den Stofftransport. Für einen idealen Tracer wird angenommen, dass keine Adsorption stattfindet.



Innerhalb eines Festgesteins dominiert der schnelle advective Transport in den gut durchlässigen Kluftsystemen, während in der kompakten Gesteinsmatrix der langsame diffusive Transport überwiegt.

Der advective Transport erfolgt mit der Abstandsgeschwindigkeit  $\vec{v}_a$  des Grundwasserstroms, vgl. Gleichung 12 und ist das Produkt aus Lösungskonzentration und Filtergeschwindigkeit /SCH 03/, vgl. Gleichung 13.

$$\vec{v}_a = \frac{\vec{v}_f}{P} = \frac{\vec{v}_f}{n_{eff}} = \frac{k_f}{n_{eff}} \nabla h \quad (12)$$

mit

$\vec{v}_a$  Abstandsgeschwindigkeit ( $L \cdot T^{-1}$ )

$P$  Porositätsfaktor (1)

$h_0$  Standrohrspiegelhöhe (L)

$n_{eff}$  effektive Porosität (1)

$$\vec{K}_{Adv} = \vec{v}_f \cdot \nabla c \quad (13)$$

mit

$\vec{K}_{Adv}$  Advektiver Massenstrom ( $M \cdot L^{-2} \cdot T^{-1}$ )

$\vec{v}_f$  Filtergeschwindigkeit ( $L \cdot T^{-1}$ )

$c$  Stoffkonzentration ( $M \cdot L^{-3}$ )

Die Dispersion wird durch Geschwindigkeitsänderungen der Grundwasserströmung in Richtung und Betrag verursacht, die der mittleren advektiven Bewegung überlagert sind. Die Abweichungen setzen sich aus dem Beitrag kleinskaliger bis megaskaliger Inhomogenitäten zusammen, vgl. Abb. 17 /KIN 95/. Es wird zwischen der longitudinalen Dispersion (in Grundwasserfließrichtung) und der transversalen Dispersion (senkrecht dazu) unterschieden.

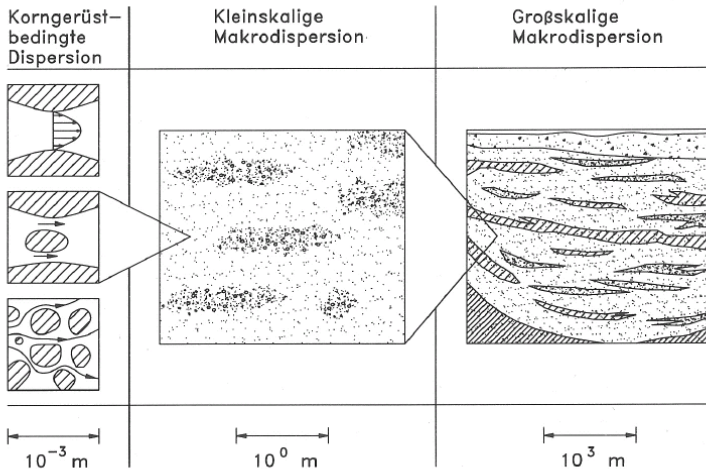


Abb. 17: Skalenabhängigkeit beim Prozess der Dispersion /KIN 95/

Der Transport durch die mechanische Dispersion ist gegeben durch:

$$\vec{K}_{Disp} = -D_d \cdot \nabla c \quad (14)$$

mit

$\vec{K}_{Disp}$  Dispersiver Massenstrom ( $\text{M} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \text{T}^{-1}$ )

$D_d$  Mechanischer Dispersionskoeffizient ( $\text{L}^2 \cdot \text{T}^{-1}$ )

Da im fließenden Grundwasser eine Unterscheidung zwischen der mechanischen Dispersion und der molekularen Diffusion nicht möglich ist, werden die beiden Größen mathematisch nach Scheidegger zu der hydrodynamischen Dispersion zusammengefasst, vgl. Gleichung 15.

$$D = D_m + D_d \quad (15)$$

mit

$D$  Hydrodynamische Dispersion ( $L^2 \cdot T^{-1}$ )

Die molekulare Diffusion wird durch die Brown'sche Molekularbewegung verursacht und ist unabhängig von der Grundwasserströmungsrichtung. Durch die Bewegung der Substanzen von Gebieten hoher Stoffkonzentration in solche niedrigerer wird ein Konzentrationsausgleich herbeigeführt, vgl. Abb. 18.

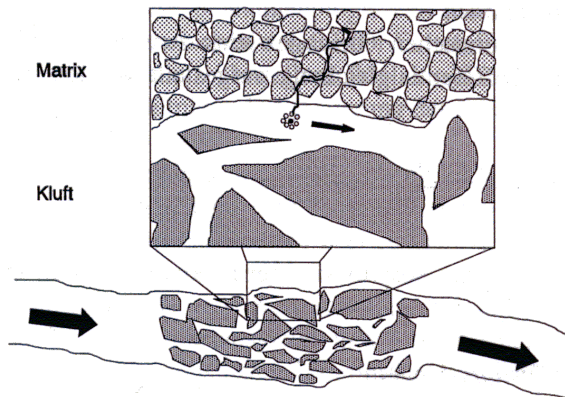


Abb. 18: Diffusion eines Stoffes aus der Kluft in die Gesteinsmatrix  
/KOL 97/

Der Vorgang wird durch das Fick'sche Gesetz beschrieben, vgl. Gleichung 16 /KOL 97/.

$$\vec{K}_{Diff} = -D_m \cdot \nabla c \quad (16)$$

mit

$\vec{K}_{Diff}$  Diffusiver Massenstrom ( $M \cdot L^{-1} \cdot T^{-1}$ )

$D_m$  Molekularer Diffusionskoeffizient ( $L^2 \cdot T^{-1}$ )

$c$  Stoffkonzentration ( $M \cdot L^{-3}$ )

Der Anteil des Stoffes, der durch molekulare Diffusion transportiert wird, ist in der Regel sehr klein und kann bei einer Abstandsgeschwindigkeit  $v_a$  der Grundwasserströmung von mehr als 0,1 m/d, in der Regel vernachlässigt werden. Bei stagnierendem Grundwasser ist die Diffusion jedoch der einzige wesentliche Transportprozess.

Unter Adsorption wird im Allgemeinen die physikalische oder chemische Bindung der Radionuklide an die Gesteinsoberfläche verstanden. Sie kann jedoch auch an Wasserinhaltsstoffen erfolgen. Die Adsorption steht in Abhängigkeit der Wasser-, Radionuklid- und Gesteinseigenschaften und kann dann je nachdem an welcher Substanz sie erfolgt, zu einer Verzögerung oder zu einer Beschleunigung ihrer Ausbreitung führen. Im Fall einer schnellen Adsorption kann von einem Gleichgewicht zwischen der adsorbierten und der gelösten Radionuklidkonzentration ausgegangen werden /LEG 96/, vgl. Gleichung 17:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = - \frac{\rho_s \cdot K_D}{n_{eff}} \cdot \frac{\partial c}{\partial t} \quad (17)$$

mit

$c$  Stoffkonzentration ( $M \cdot L^{-3}$ )

$\rho_s$  Dichte des Gesteins ( $M \cdot L^{-3}$ )

$K_D$  Verteilungskoeffizient ( $L^3 \cdot M^{-1}$ )

$n_{eff}$  Effektive Porosität (1)

Im einfachsten Fall handelt es sich um eine lineare Funktion, wie sie auch für die in Kapitel 4 vorgestellten Tracer- und Radionuklidtransportrechnungen angenommen wurde. Nicht-lineare Isotherme sind z.B. die von Freundlich und Langmuir, vgl. Abb. 19.

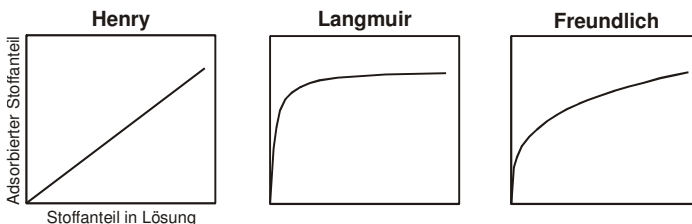


Abb. 19: Sorptionsisotherme /OHL 00/

Die **reaktiven Transportprozesse** unterliegen zusätzlich zu den Prozessen der Advektion, Dispersion, Diffusion und Adsorption bei denen die Stoffmasse unverändert bleibt, Zerfalls- oder Abbauprozessen, die die Stoffbilanz beeinflussen. Insgesamt kann zwischen Reaktionen erster Ordnung, der Michaelis-Menten-, Monod- und Arrhenius-Kinetik gewählt werden /WAS 02/, /WAS 04/, /WAS 06/.

Neben (ir)reversiblen chemischen und/oder biologischen Reaktionen können auch Zerfallsreihen berücksichtigt werden. Dabei wandeln sich Atomkerne spontan und ohne äußeren Einfluss um und senden dabei Strahlung in Form von Energie und/oder Masse aus. Der radioaktive Zerfall folgt einem Zerfallsgesetz erster Ordnung, so dass sich die Konzentrationsänderung ergibt zu /LEG 96/:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda \cdot \left( c + \frac{\rho_s \cdot K_D \cdot c}{n_{eff}} \right) \quad (18)$$

mit

- $\lambda$     Zerfallskonstante ( $T^{-1}$ )
- $c$     Stoffkonzentration ( $M \cdot L^{-3}$ )
- $\rho_s$    Dichte des Gesteins ( $M \cdot L^{-3}$ )
- $K_D$    Verteilungskoeffizient ( $L^3 \cdot M^{-1}$ )
- $n_{eff}$    Effektive Porosität (1)

Spalt- und Aktivierungsprodukte zerfallen nur in ihre Tochternuklide, während die übrigen Radionuklide einer der vier Zerfallsreihen angehören, die in vereinfachter Form in Abb. 20 dargestellt sind.

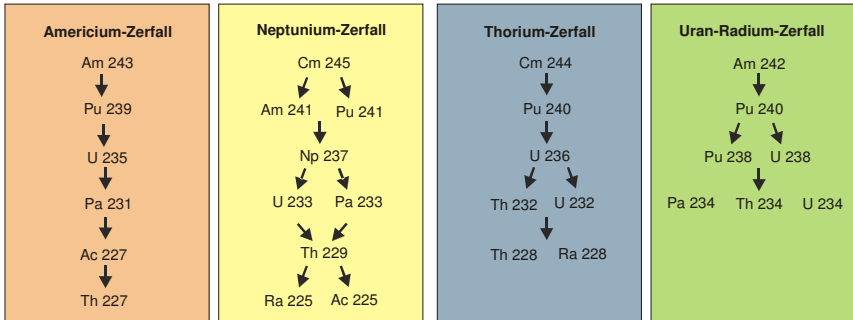


Abb. 21: Radionuklidzerfallsreihen

In dem Programm FEFLOW erfolgt die Implementierung von Zerfallsreihen für jedes Element über die Angabe von Reaktionsraten, vgl. Gleichung (19).

$$R_k = \sum_{m=1}^N k_m (c_m)^{n_m} \quad (19)$$

$$= k_1 (c_1)^{n_1} + k_2 (c_2)^{n_2} + \dots + k_N (c_N)^{n_N}$$

mit

- $R_k$  Reaktionsrate ( $\text{M} \cdot \text{L}^{-3} \cdot \text{T}^{-1}$ )
- $N$  Anzahl der Spezies (1)
- $k$  Massenkonzstante der Spezies (1)
- $m, n$  Spezies-Index (1)
- $c$  Stoffkonzentration ( $\text{M} \cdot \text{L}^{-3}$ )

Die in Kapitel 4.4.2 beschriebene Radionuklidtransportrechnung beinhaltet neben den Spalt- und Aktivierungsprodukten Sr-90, Cs-135, Cs-137 und Sm 151, welche keiner Zerfallsreihe angehören, die Radionuklide der Neptunium-Zerfallsreihe Am-241, Np-237, U-233, Pa-233, Th229, Ra-225 sowie Ac-225. Am-241 stellt dabei den größten Teil des voraussichtlichen Abfallinventars des zu errichtenden Endlagers. Zudem haben zuvor durchgeführte Berechnungen des Ausstroms aus dem Nahfeld ergeben, dass die Radionuklide der Neptunium-Zerfallsreihe am längsten für die Höhe der Strahlenexposition verantwortlich sind /WAL 05/.

Für die Berechnung des Radionuklidzerfalls werden folgende Reaktionsraten benötigt:

$$R_1 = -1 \text{ Rate}_1 c_1 \quad (20)$$

$$R_2 = +1 \text{ Rate}_1 c_1 - 1 \text{ Rate}_2 c_2$$

$$R_3 = +0.5 \text{ Rate}_2 c_2 - 1 \text{ Rate}_3 c_3$$

$$R_4 = +0.5 \text{ Rate}_2 c_2 - 1 \text{ Rate}_4 c_4$$

$$R_5 = +0.5 \text{ Rate}_3 c_3 + 0.5 \text{ Rate}_4 c_4 - 1 \text{ Rate}_5 c_5$$

$$R_6 = +0.5 \text{ Rate}_5 c_5 - 1 \text{ Rate}_6 c_6$$

$$R_7 = +0.5 \text{ Rate}_5 c_5 - 1 \text{ Rate}_7 c_7$$

wobei

*Element 1 (Am241) in Element 2 (Np237) zerfällt,*

*Element 2 (Np237) zerfällt in Element 3 (U233) und Element 4 (Pa233),*

*Element 3 (U233) und Element 4 (Pa233) zerfallen in Element 5 (Th229) und*

*Element 5 (Th229) zerfällt in Element 6 (Ac225) und Element 7 (Ra225)*



### 2.3.2.2. Wärmetransportprozesse

Der Wärmetransport vollzieht sich sowohl in der festen Phase des Gesteins, als auch innerhalb seiner flüssigkeitsgefüllten Hohlräume. In der festen Phase wird er stark von der Fähigkeit des Gesteins Wärme zu leiten und zu speichern beeinflusst. Kennwerte für diese Prozesse sind die Wärmekapazität und -leitfähigkeit.

Die spezifische Wärmekapazität  $C$  ist dabei definiert als:

$$C = \frac{\partial Q_w}{\partial T} \quad (21)$$

mit

$C$  Wärmekapazität ( $\text{E} \cdot \Theta^{-1} \cdot \text{M}^{-1}$ )

$Q_w$  Wärmemenge ( $\text{E} \cdot \text{M}^{-1}$ )

$T$  Temperatur ( $\Theta$ )

Für die Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_w$  gilt:

$$\lambda_w = \frac{Q_w}{t} \frac{d}{A(T_1 - T_2)} \quad (22)$$

mit

$\lambda_w$  Wärmeleitfähigkeit ( $\text{P} \cdot \text{L}^{-1} \cdot \Theta^{-1} \cdot \text{T}^{-1}$ )

$t$  Zeit (T)

$d$  Gesteinsmächtigkeit (L)

$A$  Messfläche ( $\text{L}^2$ )

$T_1 - T_2$  Temperaturdifferenz ( $\Theta$ )

Beide Parameter stehen in Abhängigkeit der Temperatur, vgl. Tab. 1.

Tab. 1: Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität des Wassers in Abhängigkeit seiner Temperatur /WWW 08/

Temperatur [°C]	Wärmekapazität [kJ/kg·°K]	Wärmeleitfähigkeit [W/m·°K]
0	4.218	0.569
20	4.182	0.604
40	4.179	0.632
60	4.184	0.654

Die Wärmeleitfähigkeit hängt von der Porosität des Gesteins sowie seiner mineralogischen Zusammensetzung und Korngröße der Gemengteile ab. Im Granit liegen ihre Werte im Mittel zwischen 2,2 W/m · °K und 4,0 W/m · °K /WWW 08/.

Die Wärme beeinflusst ihrerseits die physikalischen Eigenschaften des Wassers und damit auch seine Fließeigenschaften. Vor allem seine Dichte und Viskosität sind neben des herrschenden Druckes auch von der Temperatur abhängig /DIE 02/. Der Zusammenhang zwischen der Temperatur und der Dichte sowie der Viskosität des Wassers wird anhand der Abb. 22 verdeutlicht. Der Zusammenhang der verschiedenen Größen findet sich in der Bilanzgleichung des Programms FEFLOW wieder.

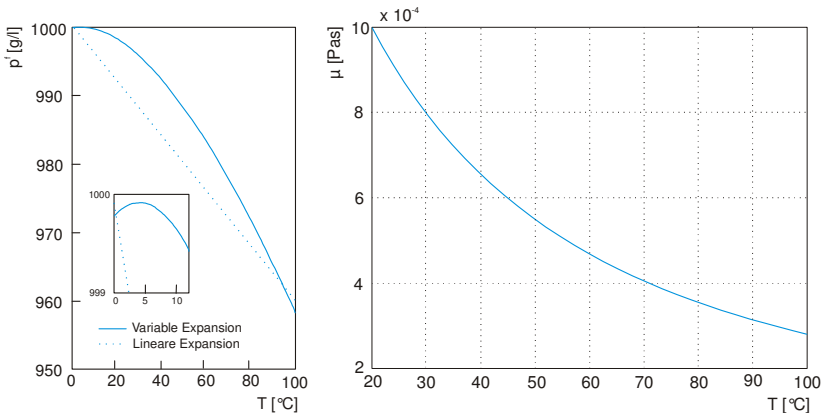


Abb. 22: Veränderung der Wasserdichte  $\rho^f$  und Viskosität  $\mu$  in Abhängigkeit der Temperatur /DIE 02/, /LOE 05/

In der Strömungs- und Transportmodellierung wird häufig vereinfachend von einem linearen Zusammenhang zwischen Fluid-Dichte und Temperatur sowie volumenunabhängigen und daher konstanten Materialparametern wie der Fluid-Kompressibilität und dem Fluid-Expansionskoeffizienten ausgegangen /DIE 02/. In dem Programm FEFLOW wird diese vereinfachte Dichtegleichung als „specific form“ der EOS („Fluid Density Equation of State“) bezeichnet. Die Vereinfachungen sind wie Abb. 22 zeigt jedoch nur für Temperaturunterschiede zwischen 4°C und 100°C gültig. Die „extended form“ der EOS berücksichtigt diese Abhängigkeiten und kann für einen größeren Temperatur- und Druckbereich ( $0^{\circ}\text{C} \leq T \leq 350^{\circ}\text{C}$ ,  $p_{\text{sat}} \leq p \leq 100\text{MPa}$ ) eingesetzt werden /WAS 05/.

Die Viskosität der fluiden Phase ist ebenfalls eine Funktion der Konzentration und der Temperatur. Sie nimmt exponentiell mit zunehmender Temperatur ab, vgl. Abb. 22. Modelltechnisch wird sie je nachdem ob es sich um einen hohen Konzentrations- oder Temperaturgradienten handelt, anhand verschiedener empirischer Ansätze beschrieben, die in /DIE 02/ beschrieben werden.

Die Veränderung des spezifischen Wasservolumens in Abhängigkeit der Temperatur ist wie Tab. 2 zeigt nur von untergeordneter Bedeutung, weshalb es in den späteren Rechnungen nicht angepasst wurde.

Tab. 2: Spezifisches Wasservolumen in Abhängigkeit seiner Temperatur  
/HYD 08/

Temperatur [°C]	Spezifisches Volumen [cm/g]
4	1.000160
20	1.001797
40	1.007842
60	1.017089

### 2.3.2.3. Gleichungssystem

Der Tracer-, Radionuklid- und Wärmetransport im Grundwasser kann mit der allgemeinen Massentransportgleichung beschrieben werden. Diese basiert auf der Bilanzierung der ein- und austretenden Massenströme eines Volumenelements unter Einbeziehung der Effekte der Dispersion, Diffusion und eines Quell- und Senkenterms. Unter den Quell- und Senkenterm fallen physikalische, chemische und biologische Reaktionen, die die Stoffkonzentration oder Wärmemenge eines Volumenelements verändern können.

Die Transportgleichung ergibt sich aus den verschiedenen Transportprozessen für eine gleichförmige Grundwasserströmung in Richtung der x-Koordinate eines gesättigten dreidimensionalen Volumenelements wie in Gleichung (23) beschrieben /LEG 96/. Die Differenzialgleichung für den Transport wird in dem Programm FEFLOW während der Modellrechnung numerisch gelöst.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} v_f \cdot \nabla c - \operatorname{div}(D \cdot \nabla c) - \frac{\partial}{\partial t} \cdot \left( \frac{\rho_s \cdot K_D \cdot c}{n_{eff}} \right) - \lambda \cdot \left( c + \frac{\rho_s \cdot K_D \cdot c}{n_{eff}} \right) \quad (23)$$

Zusätzlich lässt sich zwischen der „divergence“ und „convective“ Form der Transportgleichung wählen, vgl. Gleichungen (24) und (25) /WAS 02/. Beide Gleichungen sind physikalisch äquivalent, führen jedoch in ihrer diskretisierten Form zu einer unterschiedlichen Formulierung der Randbedingungen. Dies führt häufig zu einer qualitativ ähnlichen Ausbildung der Stoff- bzw. Wärmeausbreitung, die sich jedoch in ihrer Quantität erheblich voneinander unterscheiden kann. Die „convective form“ der Gleichung ist gebräuchlicher und für die meisten Anwendungen ausreichend obwohl nur der dispersive Teil der Strömung definiert und der konvektive Teil nicht weiter betrachtet wird. Wird der randliche dispersive Einstrom vernachlässigbar klein, wie es in der Transportrechnung des Kapitels 4.4.1 der Fall ist, wird diese Lösung nicht exakt gelöst, so dass die „divergence form“ der Gleichung genutzt werden muss. In dieser wird dann sowohl der dispersive als auch der konvektive Teil der Gleichung integriert.

$$\text{divergence form: } q_{div} = \frac{\partial}{\partial t}(Rc) + \nabla(\vec{v}c) - \nabla(D\nabla c) \quad (24)$$

$$\text{convective form: } q_{con} = R\frac{\partial c}{\partial t} + \vec{v}\nabla c - \nabla(D\nabla c) \quad (25)$$

$$\text{wobei } q_{con} = -cQ_v + q_{div} \quad (26)$$

mit

$R$  Retardation (1)

$q_{con}$  Quellen-/Senkenterm in der "convective form" ( $M \cdot L^{-3} \cdot T^{-3}$ )

$q_{div}$  Quellen-/Senkenterm in der "divergence form" ( $M \cdot L^{-3} \cdot T^{-3}$ )

$\vec{v}$  Geschwindigkeitsfeld ( $L \cdot T^{-1}$ )

## **2.4. Numerische Umsetzung**

Das Modellgebiet und die in ihm stattfindende Grundwasserströmung sowie die Transportprozesse können nie vollkommen exakt wiedergegeben werden, so dass mit Vereinfachungen und Näherungen vorlieb genommen werden muss.

Die Vereinfachung des strukturellen Gesteinsaufbaus und seiner hydraulischer Eigenschaften erfolgt in dem hydrogeologischen Strukturmodell, welches mit einem Finite-Elemente Netz vermascht wird und die Strukturen soweit ihm möglich nachbildet.

Die Strömungs- und Transportgleichung wird in dem Programmsystem FEFLOW für endlich kleine (finite) Teilflächen des Modellgebietes in diskreten Zeitschritten berechnet. Die Lösung der Gleichungen ist aufgrund ihrer Nichtlinearität und des meist großräumigen Modellgebietes sowie der Heterogenität seiner Materialparameter in Festgesteinen kein triviales Problem. Durch Stabilitätskriterien gilt es, die entstehenden Ungenauigkeiten möglichst klein zu halten.





Im Folgenden wird kurz auf die mögliche Form der Netzgenerierung, die Lösungsverfahren der Gleichungssysteme, ihrer Stabilitätskriterien und die sie beeinflussende Zeitschrittsteuerung eingegangen. Ausführlich sind diese Themen in /KOL 97/, /WAS 02/, /WAS 05/, /DIE 06/ nachzulesen.

## 2.4.1. Netzgenerierung

Die Zerlegung des Modellgebietes in Teilelemente (Diskretisierung) erfolgt mit Hilfe der Finiten-Elemente Methode. Dabei sind sowohl quadrilaterale als auch triangulare Elemente wählbar. An jedem ihrer Gitterpunkte werden die Piezometerhöhe und die Konzentration berechnet und in ihre Fläche interpoliert. Für alle im folgenden beschriebenen Modelle wurden triangulare Elemente verwendet, da mit ihrer Hilfe in dreidimensionalen Modellen die Geländeoberkante und die Ausprägung einzelner Gesteinsschichten unterschiedlicher hydraulischer Eigenschaften sowie in zweidimensionalen Modellen die Implementierung unterschiedlicher Kluftwinkel leichter angepasst werden kann.

In einem Finite-Elemente Netz können zusätzlich sogenannte diskrete Elemente erzeugt werden. Diese werden für kleinräumige und eng begrenzte Strukturen wie Klüfte benötigt. Ihre Eingabe erfolgt im Fall der 2d-Rechnungen eindimensional, im Fall der 3d-Rechnungen zweidimensional. Tab. 3 gibt einen Überblick über die Anwendungsmöglichkeit der verschiedenen Finite-Elemente und die in ihnen wählbare Strömungsgleichung.

Tab. 3: Anwendungsmöglichkeiten verschieden dimensionierter diskreter Finite-Elemente /WAS 02/

Type	Fluid motion law	Dimension	Application
	Darcy Hagen-Poiseuille Manning-Strickler	1D, plane (phreatic, non-phreatic)	channels mine stopes
		1D, axisymmetric (phreatic, non-phreatic)	pumping wells abandoned wells, boreholes
 	Darcy Hagen-Poiseuille Manning-Strickler	2D, plane (non-phreatic)	fractures faults
		2D, plane (phreatic)	runoff overland flow
	Darcy	3D (phreatic, non-phreatic)	porous media aquifer systems

### 2.4.2. Lösungsverfahren

Für die Lösung der Strömungs- und Transportgleichung stehen verschiedene iterative Gleichungslöser zur Auswahl. Standardverfahren sind das vorkonditionierte konjugierte bzw. bikonjugierte Gradientenverfahren (PCG bzw. BiCGSTAB).

Mit zunehmender Modellkomplexität, wie z.B. hohe Parameterkontraste oder einer Vielzahl von Unbekannten, erreichen diese Verfahren jedoch ihre Grenzen. Bemerkbar macht sich dies durch ein beträchtliches Anwachsen der Iterationsschritte sowie Probleme beim Erreichen der Konvergenz, wie sie besonders während der in Kapitel 4.4 vorgestellten komplexen Radionuklidtransportrechnungen zu beobachten war. In diesem Fall wurde auf einen algebraischen Mehrgitter-Gleichungslöser (AMG) zurückgegriffen. Dieser kombiniert die Informationen aus dem gegebenen Gleichungssystem in eine Hierarchie immer gröber werdender Gleichungssysteme /STU 02/. Gleichungen mit hohen Parameterkontrasten oder einer Vielzahl von Unbekannten können damit schneller gelöst werden /SCH 04/.

### 2.4.3. Schrittweiten-Steuerung

Die Wahl der Schrittweitensteuerung kann Einfluss auf die Stabilität der Modellrechnungen nehmen. Im Programm FEFLOW können drei verschiedene Schrittweitensteuerungen gewählt werden: die konstante, automatische und variierende. Im Fall der automatischen Zeitschrittweite kann zwischen den Integrationsmöglichkeiten des „forward/backward Euler“ Verfahrens für dichtegetriebenen bzw. ungesättigte Probleme oder dem „aggressiv target-based“ Verfahren für variabel gesättigte Probleme gewählt werden. Für die übrigen Schrittweitensteuerungen lässt sich bestimmen, nach welchem Zeitschritt zum „Crank-Nicolson“ Schema gewechselt werden soll, welches in seiner ersten Ordnung sehr stabil ist. Insbesondere aufgrund der unterschiedlichen Zerfallsraten der betrachteten Radionuklide, wurde für die beschriebenen Modelle die automatische Zeitschrittsteuerung gewählt.



#### 2.4.4. Stabilitätskriterien

Die Einhaltung von Stabilität, Konsistenz und Konvergenz der Rechnungen ermöglicht eine Überprüfung der berechneten Lösung. Die Stabilität führt dabei zu einer Robustheit des numerischen Lösungsverfahrens was bedeutet, dass insbesondere Rundungsfehler sich nicht aufsummieren und zu falschen Lösungen führen können. Die Konsistenz der Lösung gewährleistet, dass sich die errechnete Lösung durch Iteration an die exakte Lösung annähert. Die Konvergenz einer Lösung ist gewährleistet, wenn es sich um konsistente und stabile Lösungen handelt und sich die Ergebnisse in einem engen Bereich um die exakte Lösung befinden.

Das Programmsystem FEFLOW bietet fünf Möglichkeiten, um die numerischen Lösung zu stabilisieren. Zur Wahl stehen das „no upwinding“, „streamline upwinding“, „full upwinding“, „shock capturing“ und „least-square upwinding“ Verfahren /DIE 06/, /WAS 02/.

Das „no upwinding“ Verfahren basiert auf der Bubnov-Galerkin-Methode. Sie führt zu der besten Genauigkeit. Bei konvektiv-dominierten Transportprozessen mit grobem Gitternetz kann sie jedoch Oszillationen in den Konzentrationen und Temperaturen verursachen.

Das „streamline“ Verfahren basiert auf der Petrov-Galerkin-Methode und wird bei oszillierenden Ergebnissen empfohlen. Es stabilisiert die Rechnung durch eine Dämpfung der numerischen Dispersion.

Das „full upwinding“ Verfahren stellt den letzten Ausweg dar, um Oszillationen einzudämmen, wenn die beiden vorhergehenden Verfahren nicht zum Erfolg führen. Es kann jedoch eine hohe numerische Dispersion hervorrufen.

Das „shock capturing“ Verfahren fügt einen Dämpfungsfaktor ein, um den dominanten konvektiven Transportprozess zu stabilisieren. Es ist nur für adaptive Zeitschrittweiten verfügbar.

In den beschriebenen Rechnungen wurde in der Regel mit dem „no upwinding“ Verfahren gearbeitet. Die in Kapitel 4.4. beschriebenen Transportrechnungen kamen jedoch nicht ohne das „streamline“ Verfahren aus.

Die Genauigkeit der iterativ erzeugten Lösungsergebnisse lässt sich durch eine höhere Auflösung der zeitlichen und räumlichen Diskretisierung, sowie der Einhaltung des Courant-Kriteriums (vgl. Gleichung (27)) von  $< 1$  und einer Gitter-Peclet Zahl (vgl. Gleichung (28)) von  $\leq 2$  verbessern /KOL 97/, /JAG 02/. Durch Einhaltung des Courant-Kriteriums werden Oszillationen weitgehend unterdrückt. Eine kleine Gitter-Peclet-Zahl stellt sicher, dass der dispersive Anteil des Transportes gegenüber dem advektiven überwiegt, so dass die numerische Dispersion weniger stark ins Gewicht fällt.

$$\text{Courant – Kriterium: } Co, z = \left| \frac{u^* \Delta t}{\Delta z} \right| \quad z = x, y, z \quad (27)$$

mit

$u$  Abstandsgeschwindigkeit [ $L \cdot T^{-1}$ ]

$\Delta t$  Zeitschritt [T]

$\Delta z$  Räumliche Schrittweite [L]

$$\text{Gitter – PecletZahl: } Pe, z = \frac{u^* \Delta z}{D} \quad z = x, y, z \quad (28)$$

mit

$u$  Abstandsgeschwindigkeit ( $L \cdot T^{-1}$ )

$D$  Dispersion ( $A \cdot T^{-1}$ )

$\Delta z$  Räumliche Schrittweite (L)

### **3. Zusammenstellung und Beurteilung der Eingangsdaten für die Modellrechnungen**

Die standortbezogenen Modellrechnungen erfolgen innerhalb des russischen Untersuchungsgebietes Itatskij im Nishnekansker Granitoidmassiv, vgl. Abb. 28. Grund dafür ist die Tatsache, dass dieses von russischer Seite untersuchte Gebiet aus hydrogeologischer Sicht nach jetzigem Kenntnisstand durch seine Hochlage sowie die geringere Anzahl und günstigere Verteilung von Klüften insgesamt vorteilhaftere Standortgegebenheiten für ein Endlager aufzuweisen scheint als das benachbarte Gebiet Kamennij.

Die Grundlage der standortbezogenen Modellrechnungen stellt die in den folgenden Kapiteln vorgenommene Charakterisierung des Modellgebietes in Bezug auf seine Morphologie, klimatischen Verhältnisse, Hydrogeologie und Hydrologie dar. Die Daten liefern von russischer Seite durchgeführte Labor- und Felduntersuchungen. Fehlende Informationen werden mit Daten aus dem benachbarten Gebiet Kamenij sowie dem Schweizer Grimsel- bzw. Schwedischen Äspö-Granit ergänzt. Eine Beurteilung der standortspezifischen Datenlage findet in Kapitel 3.5 statt.

### 3.1. Lage und Morphologie

Das etwa 40 km<sup>2</sup> große Gebiet Itatskij befindet sich zusammen mit dem ebenfalls für eine Endlagerung vorausgewählten Gebiet Kamennij im nordwestlichen Teil des Nishnekansker Granitoidmassivs, vgl. Abb. 28. Dieses liegt im Süden Zentralsibiriens, etwa 20 km östlich der Stadt Krasnojarsk und ist Teil der Mittelsibirischen Hochebene, vgl. Abb. 22.

Aufgrund des sehr alten, zum größten Teil bereits vor mehr als 570 Millionen Jahren entstandenen Gebirgsmassivs und der seitdem stattgefundenen Erosion weist das Gebiet ein wenig gegliedertes Relief mit Höhen zwischen 260 m.ü.NN und 650 m.ü.NN auf.

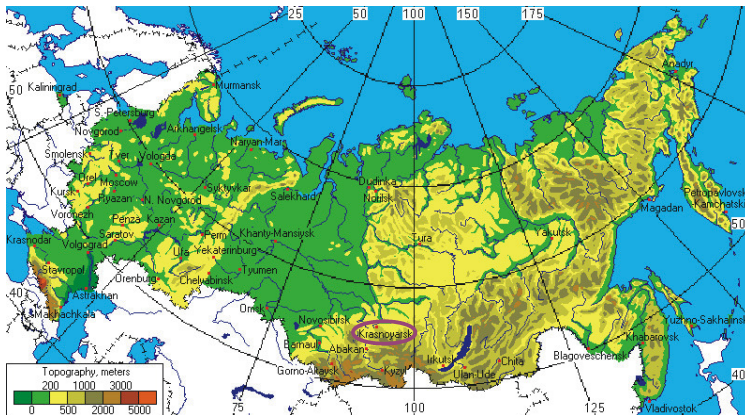
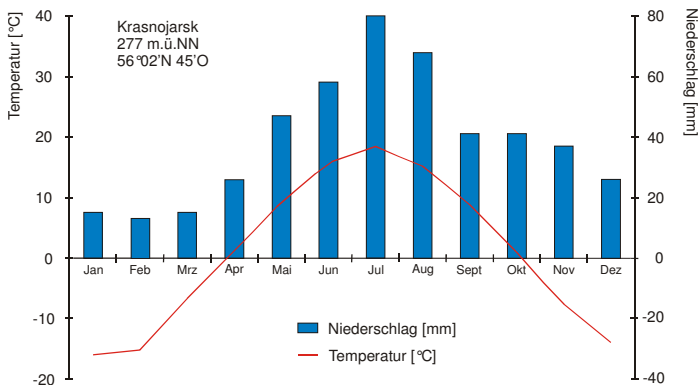


Abb. 23: Lage des Untersuchungsgebietes

## 3.2. Klimatische Bedingungen

Heute ist das Untersuchungsgebiet durch ein stark kontinentales Klima gekennzeichnet. Die jährliche Temperaturamplitude beträgt bis zu 65°C mit einer jährlichen Durchschnittstemperatur von weniger als 1°C. Nur im Sommer steigen die Temperaturen etwa drei Monate lang über 10°C. Der Niederschlag weist einen Jahresgang auf. Aufgrund der Kontinentalität handelt es sich vor allem um Konvektionsniederschläge /WEI 99/, die bevorzugt in den Monaten April bis Oktober niedergehen und etwa  $\frac{3}{4}$  der Jahresniederschlagsmenge von im Mittel unter 500 mm ausmachen. Nach der Klimaklassifikation von Köppen und Geiger handelt es sich demnach um ein Dfc-Klima. Das Klimadiagramm der Station Krasnojarsk in Abb. 24 veranschaulicht die gemachten Aussagen anhand von Mittelwerten im Zeitraum zwischen den Jahren 1951 und 1994.



	Jan	Feb	Mrz	Apr	Mai	Jun	Jul	Aug	Sept	Okt	Nov	Dez
°C	-16	-15,2	-6,7	1,3	9,2	15,7	18,4	15,2	8,9	0,9	-7,6	-14
mm	15	13	15	26	47	58	80	68	41	41	37	26

Jahresmitteltemperatur: 0,84 °C  
Jahresniederschlagssumme: 467 mm

Abb. 24: Klimadiagramm der Region Krasnojarsk /WWW 05/. Dargestellt sind Mittelwerte der Jahre 1951 bis 1994.

Das Untersuchungsgebiet Itatskij liegt etwa 20 km östlich der Stadt Krasnojarsk und weist laut russischer Angaben eine etwas höhere jährliche Durchschnittstemperatur sowie höhere Niederschlagswerte (540 mm/a bis 560 mm/a) auf. Die Evapotranspirationsrate liegt zwischen 480 mm/a und 500 mm/a /WAL 05/.

In Sibirien steigen die Temperaturen in südlicher Richtung an, womit auch die Dauer der frostfreien Periode und die Evapotranspirationrate zunehmen. Permafrost kann bis in Breiten von etwa 60°N nachgewiesen werden, vgl. Abb. 25. Die Verteilung der Temperatur und Feuchtigkeit verursacht eine latitudinale Vegetationszonierung innerhalb der sibirischen Ebene von der Tundra über die Taiga zur Steppe /VEL 05/.

Aufgrund seiner geographischen Lage sowie der klimatischen Verhältnisse befindet sich das Untersuchungsgebiet heute in der russischen Taiga, wird von einem borealen Wald bedeckt und besitzt keinen Permafrostboden.

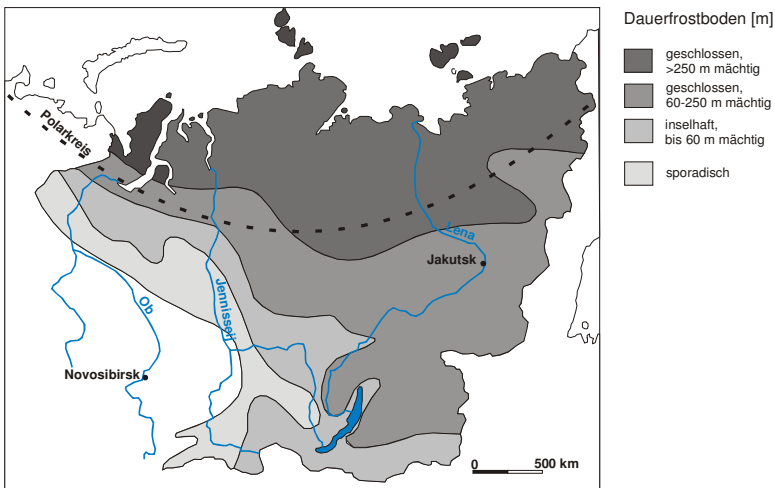


Abb. 25: Verbreitung von Permafrostgebieten in Russland /WEI 99/

Die klimatische Vergangenheit Sibiriens und die Frage wie weit die Vereisung vom Barent-See bzw. Kara-See ausgehend nach Süden voranschritt bzw. ob und in welchen Gebieten es Inlandvereisungen gegeben hat, werden noch immer kontrovers diskutiert. Unbestritten ist, dass es in Ost- wie auch in West-Europa drei große glaziale Vorstöße gegeben hat /VEL 86/.

Die Gletscher stießen aus Skandinavien und vom Barent-Kara Meer ausgehend nach Osten und Süden vor /HUB 04/. Auf der Grundlage von Satelliten- und Luftbildaufnahmen, geologischen Felddaten sowie marinen seismischen Untersuchungen und Sedimentkernen wurden die maximalen Eisränder des Eurasischen Eisschildes für die frühe (90 ka bis 80 ka) und mittlere Weichselzeit (60 ka bis 50 ka) sowie das Weichselhochglazial (25 ka bis 15 ka) nachgebildet /SVE 04/, vgl. Abb. 26. Demnach ist das Eis in seiner südlichen Verbreitung nicht weiter als 60°N vorgedrungen. Als wichtigstes Indiz dafür werden die Endmoränenwälle, die sich von der Westsibirischen Ebene über den Ural und den Fluss Jenniseij sowie das zentrale Sibirische Hochland bis hin zum Fluss Olenek ziehen, angeführt /ARK 86/. Im Bereich des Flusses Jenniseij sind diese Endmoränenwälle bei 67°N in Form der Yermakovo und Denezhkino Moränen deutlich sichtbar /SVE 04/. Wegen der niedrigen Temperaturen in Zentral Russland und den damit verbundenen geringen Niederschlagsraten von weniger als 50 mm/a werden Inlandgletscher nur für begrenzte Hochlagen wie dem Putorana Plateau angenommen /HUB 04/, /WEI 99/.

### 3. Zusammenstellung und Beurteilung der Eingangsdaten für die Modellrechnungen

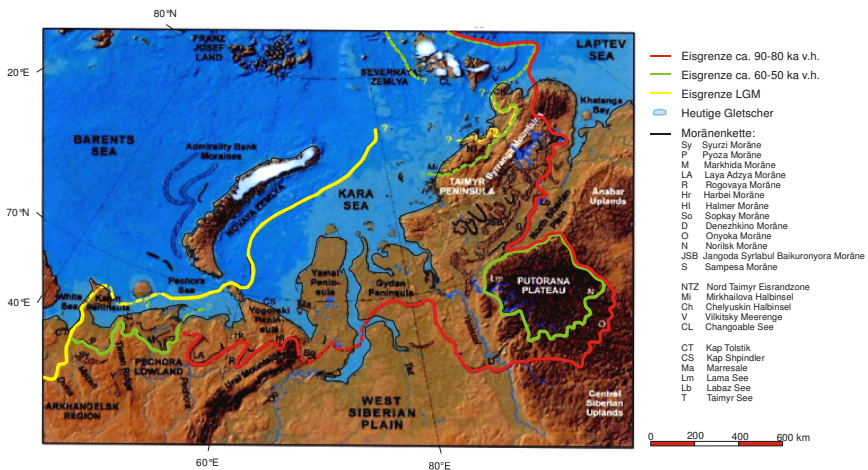


Abb. 26: Bisher nachgewiesene maximale Ausbreitung der quartären Gletscher in Russland /SVE 04/

Das Untersuchungsgebiet Itatskij liegt etwa bei 56° nördlicher Breite und wurde somit nach den bisherigen Erkenntnis nicht glazial überprägt. Dafür sprechen auch die den kristallinen Festgesteinskörper überdeckenden Sedimente jurassischen Alters. Es gilt daher als wahrscheinlich, dass das Gebiet während der angesprochenen Vereisungen durch eine dem Gletscher vorgelagerte Steppe und/oder Tundra gekennzeichnet war /JOB 08/.



### 3.3. Geologische Situation und Genese

Die Regionalgeologische Situation ist durch das Aufeinandertreffen vieler unterschiedlich großer Kontinente über viele Millionen Jahre geprägt. Der Hauptteil des heutigen Gebietes der Gemeinschaft Unabhängiger Staaten (GUS) besteht aus vier, mehr als 540 Mio. Jahre alten präkambrischen, kontinentalen Schilden, vgl. Abb. 27. Während ihrer Konsolidierung vor etwa 250 Mio. Jahren entstanden im Bereich der Plattengrenzen Faltungszonen und Überschiebungsbereiche /CHA 95/. In der Folgezeit kam es zur Akkretion unzähliger kleiner Mikrokontinente, Inselbögen und Akkretionskeile, die über phanerozoische Faltenzonen mit den Großstrukturen verbunden sind und zu einer Vergrößerung des Kontinents nach Osten führten /ZON 90/.

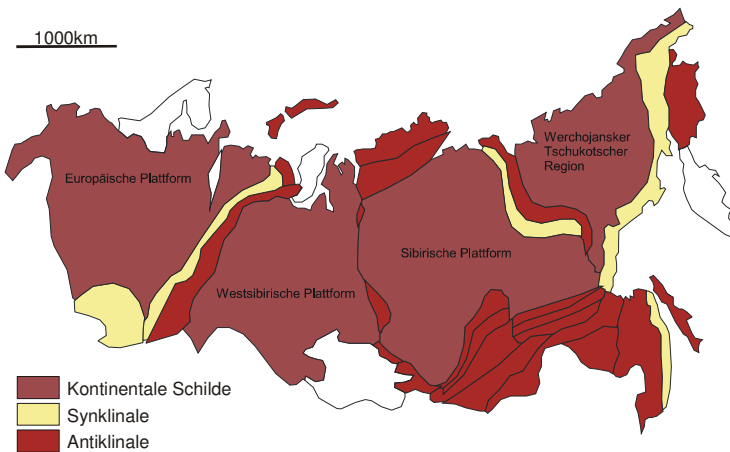


Abb. 27: Geologischer Aufbau der GUS /DOL 94/

Die Schilde und die Faltungszonen an ihren Rändern sind auch heute im rezenten Relief noch gut sichtbar. Die Schilde sind flach gewölbt, weitgehend durch Abtragung zu Rumpfflächen eingeebnet und weisen daher nur schwach gegliederte Landschaften auf, während die Plattengrenzen in Folge der Plattenkollisionen in weiten Bereichen als hohe Gebirgskörper aufragen, vgl. Abb. 28.

Zentralsibirien ist Teil der **Sibirischen Plattform**. Diese stellt die älteste Kontinentalmasse innerhalb der GUS dar und gehört weltweit zu einer der größten Schilde alter kontinentaler Kruste /CHA 95/. Sie besitzt ein frühkambrisches, zu großen Teilen archaisches Basement und weist einen Durchmesser von etwa 2 500 km mit einer durchschnittlichen Krustenmächtigkeit zwischen 35 km und 40 km auf. Der Rand der Plattform unterlag während des Phanerozoikums einer strukturellen Überprägung und wird vom Süden und Westen her von präkambrischen sowie spätproterozoischen bis paläozoischen Faltenzonen, im Nordosten von solchen mesozoischen Alters eingerahmt. Im Känozoikum wurde die gesamte Plattform angehoben und es bildeten sich weiträumige und tiefgründige Verwitterungskrusten aus, die zumeist von quartären Ablagerungen überbedeckt wurden.

Die Grenze der Sibirischen Plattform ist größtenteils geradlinig als Tiefenstörung ausgebildet und folgt im Osten dem Tal des Flusses Lena bis zur Aldan-Mündung, im Süden entlang der Gebirgszüge des Baikals, Ost-Sajan und Jenniseij bis zum Fluss Jenniseij im Gebiet von Krasnojarsk und im Westen dem Tal des Jenniseij von Krasnojarsk bis zum Hafen von Dudinsk, vgl. Abb. 31.

Das präkambrische Basement ist an verschiedenen Stellen an der Oberfläche aufgeschlossen, vor allem in Form des Aldan-Schildes und des Anabar-Massivs aber auch in einer Reihe kleinerer Vorkommen innerhalb der Baikal Region und den Aufsattelungen des Ost-Sajan und den Jenniseij- und Turuchan Hebungsgebietes längs des Jenniseij Tales /SCH 58/, vgl. Abb. 28. Es enthält basische und granitische Intrusivkörper, die während des Präkambriums zwischen 1 000 Mio. und 850 Mio. Jahre und während der baikalischen Tektonogenese des Silurs aufgestiegen sind. Innerhalb des präkambrischen Fundamentes lassen sich zwei Gruppen regionaler Störungszonen erkennen: Die NW-SO streichende Jenniseijsker und die NO-SW streichende Angara-Gruppe. Im Unterbau der Sibirischen Tafel wurden Brüche und Riftstrukturen nachgewiesen, die sich bis an die Oberfläche durchprägen, vgl. Abb. 28. Diese sind mit klastischen Ablagerungen, Vulkaniten und Sedimenten des Proterozoikums gefüllt.

Im Verlauf der erdgeschichtlichen Entwicklung veränderten sich die wirkenden Spannungsfelder häufiger und verursachten dadurch komplex gestaltete Trennfugensysteme, mit zahlreichen Verbiegungen sowie lokalen Auf-, Ab- und Verschiebungen. Die hydraulische Durchlässigkeit des Gesteins und seiner Trennflächen erfuhren dadurch große Variationsbreiten.

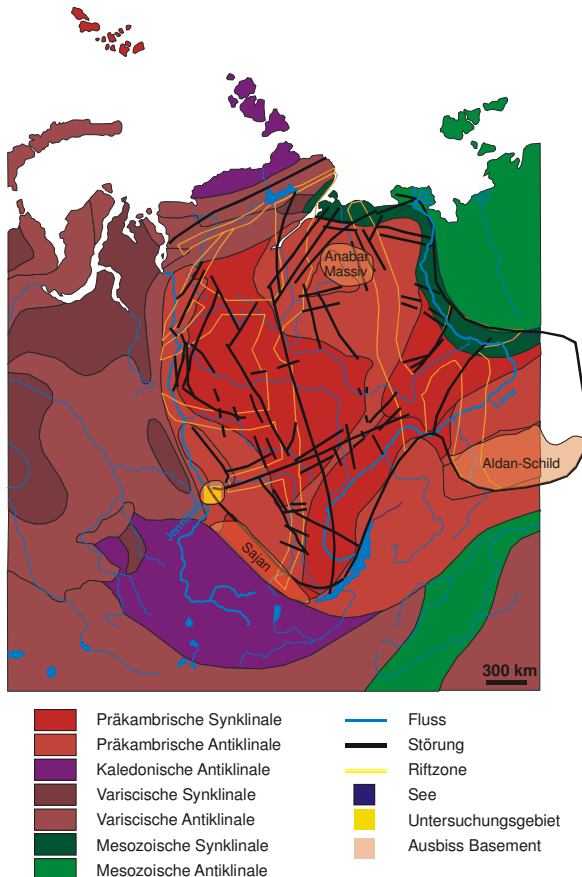


Abb. 28: Geologische Großstrukturen der Sibirischen Tafel /DOL 94/

Das in NW-SO Richtung verlaufende **Nishnekansker Granitoidmassiv** liegt im südwestlichen Randbereich der Sibirischen Plattform innerhalb der Jenniseijsker Gebirgskette, die eine schollenartige Heraushebung des baikalidischen Fundaments der Sibirischen Plattform darstellt /CHA 95/. Diese Sajan-Jenniseij Faltenzone erstreckt sich entlang der Westgrenze des Sibirischen Schildes zwischen der Gebirgsregion des Ostsajan im Süden und der Turuchansker Erhebung im Norden.

In den Randgebieten der Jenniseijsker Gebirgskette lassen sich vereinzelt Beeinflussungen durch die Faltungs- und Metamorphoseprozesse feststellen /AND 96/. Nach Westen hin taucht die Gebirgskette unter den bis zu 2 500 m mächtigen mesozoisch-känozoischen sedimentären Deckschichten der Westsibirischen Platte ab /KHA 85/, /KHA 94/.

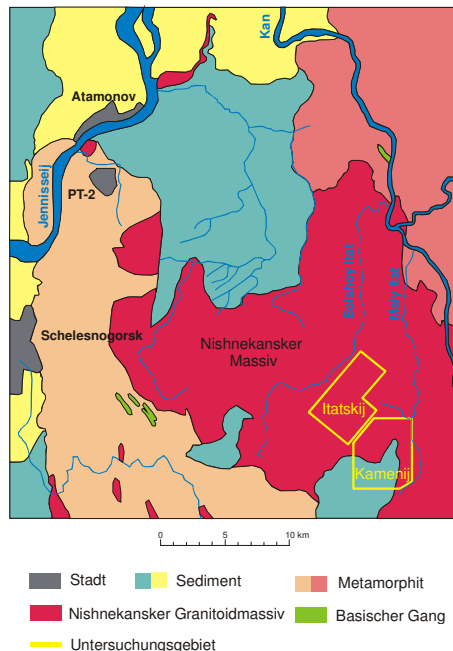


Abb. 29: Geologische Karte des Nishnekansker Massivs mit den Untersuchungsgebieten Itatskij und Kamennij /AND 01 überarbeitet/

Das Nishnekansker Granitoidmassiv ist Teil eines weitgehend starren Krustenblocks, der von mächtigen Störungszonen umgeben ist, welche es vom Ostsajan und der Westsibirischen Platte durch ein System paralleler, N-S streichender Tiefenbruchzonen trennt. Der Großteil dieser Störungszonen besteht aus Überschiebungen, mit einem Einfallen der Verschiebungsflächen zwischen 50° und 70° in Richtung der Sibirischen Tafel.

Die Bildung des Nishnekansker Granitoids ist auf spätproterozoische Subduktionsprozesse zurückzuführen. Es handelt sich um einen intrudierten Batholith, der zum Zeitpunkt des Eindringens vor etwa  $920 \pm 50$  Millionen Jahren durch einen 5 km mächtigen Metamorphit überdeckt war /VOL 61/. Der Plutonit besitzt im Zentralteil eine Mächtigkeit von mindestens 2 km und gehört mit einer Länge von 55 km sowie einer Breite zwischen 15 km und 25 km zu einem der größten Granitoidmassive weltweit. Es handelt sich um ein sehr homogen aufgebautes Gestein, das zumeist aus den Gesteinsvarietäten Tonalit, Leukogranit, Granit, Granodiorit, Quarzdiorit, Diorit und Granitgneis besteht. Ihre Übergänge sind makroskopisch kaum feststellbar. Innerhalb des Granitoidmassivs sind magmatische Gänge in Form von Apliten, Diabasporphyriten und Lamprophyren ausgebildet. Das tiefe Intrusionsniveau, der postorogene Charakter des Plutonits und seine Zugehörigkeit zu einem seit etwa 900 Millionen Jahren starren, von mächtigen, plastisch reagierenden Deformationszonen umgebenden Krustenblocks, haben zu einer vergleichsweise geringen tektonischen Überprägung und Deformation seiner Gesteine geführt /ZIE 04/. Sie unterlagen im Verlauf der Zeit jedoch einer hydrothermal-metasomatischen Alteration, die zu der Bildung von Myloniten und Kataklasten sowie Mineralum- und -neubildungen, u.a. in Form von Quarz-Feldspatgängen führte. Diese Alterationszonen erreichen Mächtigkeiten von bis zu 50 m. Zudem lassen sich Granitgneise und kristalline Schiefer bis 10 m Mächtigkeit nachweisen. Vor allem im Umfeld von Klüften und im Kontaktbereich von Dykes bildeten sich Gesteinsbereiche, die durch intensive Kataklaste (vgl. Kapitel 2.1.2.1) begleitet werden.

Die Itatskij-Hochebene befindet sich im Nordosten des Nishnekansker Granitoidmassivs und enthält die Untersuchungsgebiete **Itatskij** und Kamenij. Ihre Bruchstrukturen wurden präkambrisch angelegt und im Verlauf des Mesozoikums und Tertiärs/Quartärs reaktiviert und leicht modifiziert. Rezent erfolgt im Westteil eine Einengung in NO-SW und eine Dehnung in NW-SO Richtung, im Ostteil dagegen eine N-S Einengung und eine Dehnung in O-W Richtung /ZIE 04/, /RUS 96/.

Die sich daraus ergebenden Trennfugen in NS- bis NW/SO- als auch in WO-Richtung sind in Abb. 30 dargestellt und durch ein steiles Einfallen von 80° bis 90° sowie eine intensive Kataklyse und Mylonitisierung charakterisiert, vgl. auch Kapitel 2.1.2.

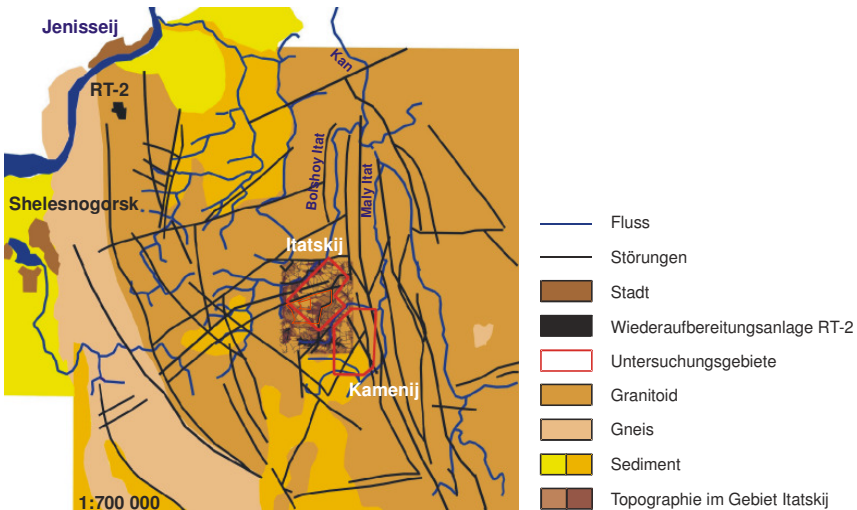


Abb. 30: Lage und Bruchstrukturen im Umfeld des Gebietes Itatskij  
/AND 93 modifiziert/

Die präkambrisch angelegten Aufschiebungen, die von den Flussläufen des Malij Itat und Bolshoj Itat markiert werden, fallen nach NW-W ein, so dass die östliche Scholle aufgeschoben ist. Der Versatzbetrag liegt zwischen 50 m und 70 m und der Einfallwinkel beträgt bei der Bolshoj-Itat Störung bei 75° bis 80°, die Malij-Itat-Störung steht nahezu senkrecht. Beide Störungen werden durch zahlreiche kleinere NW-SO bzw. O-W streichende Trennfugen begleitet. Die Lagerklüfte des Plutons fallen mit einem Winkel von 5° bis 20° flach und bevorzugt nach NW ein /AND 98/. Die senkrecht auf den Lagerklüften stehenden Längs- und Querklüfte sind durch ein steiles Einfallen zwischen 80° bis 90° gekennzeichnet, wobei die Längsklüfte bevorzugt in südlicher, die Querklüfte dagegen in westlicher und östlicher Richtung streichen. Beide werden häufig durch Aplite, Pegmatite oder Quarzgänge markiert. An den Kontaktflächen der Intrusionsphasen sind keine offenen Klüften oder Spuren intensiver hydrothermal-metasomatischer Alterationsprozesse erkennbar.

Die flächenhafte Erosion des topographisch wenig gegliederten Gebietes führte zu der Entwicklung einer bis zu 150 m mächtigen Verwitterungskruste. Lediglich in jurassischer Zeit kam es entlang von Störungszonen zu deutlichen Absenkungen, was zu der Entstehung flachmariner Becken und einer lokalen Bildung von Sandsteinen und kohlehaltigen Sedimenten führte, deren Mächtigkeit heute bis zu 250 m beträgt.

### 3.4. Hydrologie und Hydrogeologie

Das Untersuchungsgebiet befindet sich im Unterlauf des Flusses Kan zwischen den Flüssen Bolshoy Itat und Maly Itat und ist durch diese an das Flusssystem des Jenniseij angeschlossen. Dieser ist mit etwa 4 100 km Länge der drittgrößte Fluss Russlands und entwässert, da Sibirien an drei Seiten von Gebirgen umrahmt und nur zum Nördlichen Eismeer hin offen ist, in nördlicher Richtung, vgl. Abb. 31 /WEI 99/. Der Jenniseij wird in erster Linie durch Schmelzwasser gespeist. Sein Abflussgang zeichnet sich damit durch starkes Hochwasser von Mai bis Juni und eine nur verhältnismäßig geringe Wasserführung in den Monaten August bis April aus. Der Flussverlauf wird neben der Topographie auch durch die vorhandenen Störungszonen bestimmt.

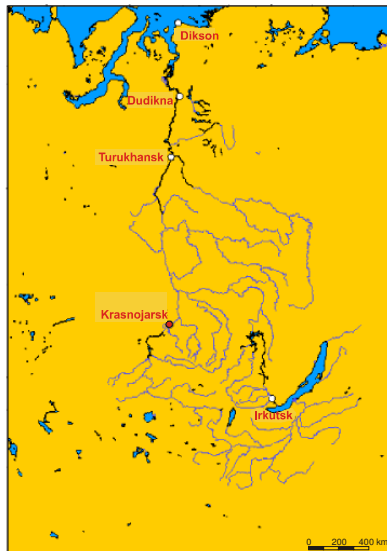


Abb. 31: Flusssystem des Jenniseij /WEI 99/

Der Grundwasserspiegel im Untersuchungsgebiet wiederholt in abgeflachter Form die Topographie und beläuft sich in den Flusstälern auf Werte zwischen 2 m u.GOK und 10 m u.GOK sowie 20 m u.GOK bis 30 m u.GOK im Bereich der Wasserscheide.

Hydrochemische Untersuchungen weisen auf einen beträchtlichen Anteil exfiltrierenden Grundwassers im Bereich der Vorfluter Malij Itat und Bolshoj Itat hin /RUS 96/, /ZIE 04/. Aufgrund der Vegetation, dem geringen Oberflächenrelief und gut durchlässigen Deckschichten findet lediglich ein geringer Oberflächenabfluss statt /AND 93/.

Der hydrogeologische Tiefenbau des Nishnekansker Massivs resultiert aus der Wechselfolge früherer und rezenter Spannungszustände, vgl. Kapitel 3.3. Die Angaben zu den geologischen Einheiten und deren Durchlässigkeitsbeiwerten sind in Tab. 4 zusammengestellt. Der Granitoid besitzt eine massige, monolithische Textur mit geringen effektiven Porositäten zwischen 0,26% und 0,52% /WAL 05/. Die metasomatisch überprägten Ganggesteine weisen in der Regel geringfügig höhere effektive Porositäten bis zu 0,82% auf /WAL 05/, /VEL 01/. Die sekundäre Porosität innerhalb der Klüfte kann dagegen um Größenordnungen höher liegen.

Der geklüftete Granitoid wird von porösen Deckschichten aus quartären und jurassischen Sedimenten mit Mächtigkeiten bis zu 50 m überdeckt. Diese besitzen einen Durchlässigkeitsbeiwert von maximal  $1 \cdot 10^{-4}$  m/s beträgt /WAL 05/. Daran schließt sich eine Zone mit verwittertem Ausgangsgestein an, welches bis in eine Tiefe von 145 m u.GOK reicht und Durchlässigkeitsbeiwerte zwischen  $1 \cdot 10^{-5}$  m/s bis  $1 \cdot 10^{-9}$  m/s besitzt /WAL 05/. In Abhängigkeit der tektonischen Beanspruchung entstanden in diesem Bereich Störungs- und Schieferungszonen sowie eine Vielzahl an Klüften, deren Anzahl jedoch zwischen 350 m und 500 m stark abnimmt. Das sich darunter befindliche Ausgangsgestein ist weitgehend intakt. Bis 1 000 m u.GOK, im Ausnahmefall auch 2 500 m u.GOK, werden Gebirgsdurchlässigkeiten in der Größenordnung zwischen  $2 \cdot 10^{-10}$  m/s und  $2 \cdot 10^{-8}$  m/s nachgewiesen /WAL 05/. Darunter liegen die Werte zwischen  $1 \cdot 10^{-11}$  m/s bis  $1 \cdot 10^{-14}$  m/s, so dass in diesem Bereich nur noch eine stark eingeschränkte Grundwasserströmung stattfindet.

Dort wo die Klüfte durch auskristallisierte Sekundärminerale verheilt sind, beträgt die Gesteinsdurchlässigkeit in der Regel 10-11 m/s und weniger /WAL 05/, /APP 01/, /NAG 94/. Schieferungszonen sowie der Kontaktbereich zu mafischen Dykes weisen mit etwa  $8 \cdot 10^{-8}$  m/s deutlich höhere Durchlässigkeiten auf /WAL 05/.



Tab. 4: Tiefenzonierung und Durchlässigkeitsbeiwerte der geologischen Einheiten im Granitoid des Nishnekanser Graniotoidmassivs /ZIE 04/, /WAL 05/

Schichtenfolge	Durchlässigkeit	
	Matrix (m/s)	Klüfte (m/s)
Sedimente	bis 50 m.u.GOK: bis $1 \cdot 10^{-4}$	-
Verwitterungszone	bis 150 m.u.GOK: $1 \cdot 10^{-9}$ bis $1 \cdot 10^{-5}$	
Weitgehend unverwitterter Granitoid	1 000 bis 2 500 m.u.GOK: $2 \cdot 10^{-10}$ bis $2 \cdot 10^{-8}$	$10^{-9}$ bis $7 \cdot 10^{-5}$
	bis 8 000 m.u.GOK: $10^{-14}$ bis $10^{-11}$	$\leq 10^{-10}$ , meist $\leq 10^{-12}$
Kontaktbereich zu basischen Dykes	-	$10^{-8}$ bis $10^{-9}$
Lamprohyr-Gang	-	$10^{-10}$
Schieferungszone	-	$8 \cdot 10^{-8}$
Störungszone	-	$10^{-8}$ bis $10^{-11}$

### 3.5. Beurteilung der vorhandenen Daten

Die Untersuchungen im Gebiet Itatskij erfolgten bisher vor allem großflächig in Form geophysikalischer Messungen, wie z.B. Gravimetrie, Seismik, Geoelektrik und Geomagnetik sowie Satelliten-, Luftbild- und geologisch-tektonischer Geländeaufnahmen. Ergebnis dieser Arbeiten ist eine Abgrenzung der Lockersedimente (quartäre bzw. jurassische Sedimente und der Verwitterungszone) von nur wenig gestörten Gesteinsblöcken sowie Bereichen erhöhter Kluftdichte bis in 3 km Tiefe.

Zusätzlich liegen die Ergebnisse einer Erkundungsbohrung bis in 500 m Tiefe vor. Vier weitere Bohrungen wurden im Umfeld des Gebietes Itatskij abgeteuft. Von zweien sind bis auf deren Lage und Endtiefe keine weiteren Informationen bekannt. Die anderen zwei Bohrungen befinden sich in dem Gebiet Kamennij und wurden bis in Tiefen von 480 m und 700 m abgeteuft, wobei ein Ausbau lediglich bis 80 m bzw. 100 m Tiefe und damit bis maximal in die Verwitterungszone erfolgte. Bei der Durchsicht der Bohrerergebnisse stellte sich zudem heraus, dass keine orientierten Bohrkerne gewonnen wurden, so dass die angetroffenen Klüfte nicht räumlich orientiert werden können /ZIE 04/. Hohe Kernverluste sowie die Durchführung von Pumpversuchen in 50 m Intervalle lassen auf Unzulänglichkeiten bei der Durchführung der Arbeiten schließen, so dass auch eine korrekte Durchführung der Messungen angezweifelt wird /ZIE 04/. Die große Bandbreite der dokumentierten Durchlässigkeitsbeiwerte kann daher sowohl Ausdruck wechselnder mechanischer Beanspruchung sein als auch auf eine mangelnde Qualität der Messungen hinweisen. Eine Beprobung der Tiefengrundwässer fand nicht statt. Grundwasserpegeldaten sind nicht vorhanden. Desweiteren fehlen ausführliche Angaben zu den Messbedingungen und eingesetzten Methoden.

Insgesamt ist ein Großteil der von russischer Seite zur Verfügung gestellten Karten, Schnitte und Schemata in Bezug auf die Wiedergabe der Topographie und Flusssysteme, der Positionen der geophysikalischen Messprofile und die maßstabsgetreue Abbildung der geologischen Sachverhalte ungenau /ZIE 04/. Dadurch wird deren Interpretation erheblich erschwert. Unbefriedigend sind vor allem der Kenntnisstand zur Verteilung und räumlichen Anordnung der Kluftsysteme, von Störungszonen und Kontaktbereichen sowie deren hydraulische Eigenschaften. Eine detaillierte Beschreibung der bis in das Jahr 2005 erfolgten Untersuchungen, sowie ihre Beurteilung und Bewertung finden sich in /WAL 05/.

## 4. Entwickelte Modelle und ihre Ergebnisse

Die Modellierung erfolgte in mehreren aufeinander aufbauenden Teilschritten mit zunehmender Komplexität. Auf kleinräumige, wenige hundert Meter umfassende Modellrechnungen folgten solche lokaler zweidimensionaler sowie regionaler dreidimensionaler Ausprägung. Im Vordergrund standen die Untersuchung der Ausbreitungspfade von Tracern und Radionukliden, letztere auch unter Berücksichtigung ihrer Zerfallsreihen.

Die Modellrechnungen wurden in dem granitoiden Ausgangsgestein und seiner darüber liegenden Verwitterungszone und Sedimente durchgeführt. Ihre Kalibrierung war anhand der vorhandenen Gebietsdaten nicht möglich, so dass lediglich Plausibilitätsprüfungen durchgeführt wurden.

Aufgrund der mangelhaften Datenlage und der häufig fehlenden Belastbarkeit der zur Verfügung stehenden Daten wurde die Modellerstellung erheblich erschwert, vgl. Kapitel 3.5. Eine Datenrecherche in ähnlich gearteten Gesteinen war notwendig, um für den Modellaufbau die fehlenden Informationen zu gewinnen. Aufgrund der zur Verfügung stehenden Daten konnten lediglich stark vereinfachte Standortmodelle erstellt werden.

Die Modellergebnisse werden in den nachfolgenden Kapiteln dargestellt und im Anschluss zusammenfassend, auch im Hinblick auf eine mögliche Ergänzung des eindimensionalen sicherheitsanalytischen Programmcodes CHETMAD sowie einer möglichen Vereinfachung der praktischen Erkundung des kristallinen Festgesteins diskutiert.

## 4.1. Vorstudie

Ein geklüftetes kristallines Festgestein enthält in der Regel mehrere Kluftsysteme. Diese unterscheiden sich in ihrer Orientierung, Öffnungsweite, Konnektivität, Füllung und damit der hydraulischen Durchlässigkeit, wodurch sie Einfluss auf die Strömungs- und Transportprozesse nehmen. Daher werden in den folgenden Modellen neben der Auswirkung unterschiedlicher Matrixdurchlässigkeiten auch vereinfachte, im Gestein immer wiederkehrende Kreuzungsmuster von Klüften untersucht.

### Modellaufbau

Der betrachtete zweidimensionale Modellblock ist 100 m tief und 200 m lang. Dem Modell liegt ein vom linken zum rechten Rand hin von 386 m auf etwa 375 m gleichmäßig abfallender hydraulischer Gradient zugrunde. Der Potentialgradient wurde aus der hydrodynamischen Gesamtsituation des Untersuchungsgebietes abgeleitet, vgl. Kapitel 4.2 Beide Ränder sind durch eine Festpotentialrandbedingung (Dirichlet) belegt. Es handelt sich um einen gespannten Aquifer. Die Modellannahmen sind in Abb. 32 veranschaulicht.

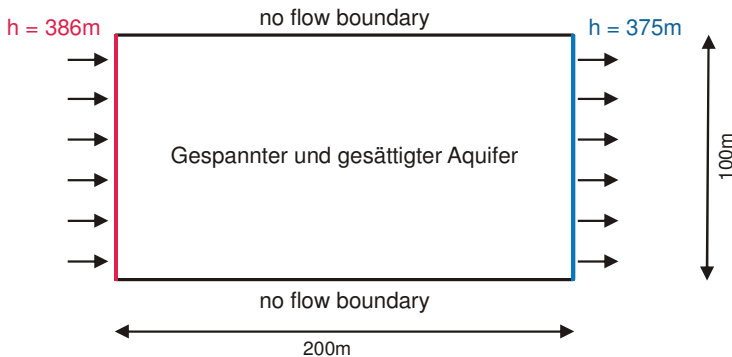


Abb. 32: Modellannahmen für das zweidimensionale Detailmodell

Für die **Gesteinsmatrix** werden drei unterschiedliche Durchlässigkeitsbeiwerte verwendet: Werte  $6 \cdot 10^{-8}$  m/s,  $1 \cdot 10^{-9}$  m/s und  $5 \cdot 10^{-11}$  m/s. Diese Werte orientieren sich an dem Mittel- und Median-Wert der russischen Daten. Der Median-Wert ist zudem mit demjenigen vergleichbar, den die NAGRA (Nationale Genossenschaft für die Lagerung radioaktiver Abfälle) mit  $4.2 \cdot 10^{-11}$  m/s im Untertagelabor Grimsel ermittelt hat /NAG 94/.

Die **drei Kluftvarianten** stellen sich wie folgt dar, vgl. Abb. 33:

- Variante 1 enthält drei zueinander versetzte Klüfte K1, K2 und K3, die horizontal in Richtung des hydraulischen Potentials angeordnet sind. Diese Anordnung könnte z.B. den Bereich einer in sich gegliederte Lagerkluft darstellen.
- Variante 2 enthält zwei zueinander senkrecht angeordnete Klüfte K1 und K2. Die horizontale Kluft K1 liegt in, die Querkluft K2 senkrecht zur Grundwasserströmung.
- Variante 3 enthält zwei Klüfte, wobei eine Kluft K1 in Richtung der Grundwasserströmung verläuft und von einer zweiten Kluft K2 in Form einer flach einfallenden Querkluft gekreuzt wird.

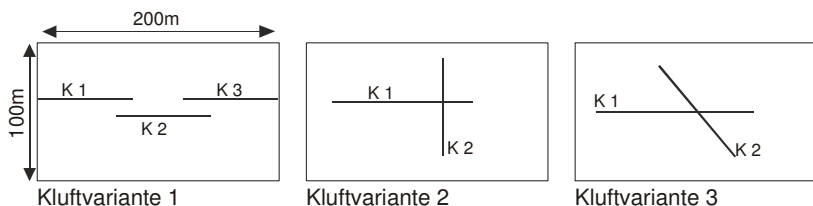


Abb. 33: Untersuchte typische Kluftgeometrien

Die Klüfte wurden als diskrete Elemente in das Modell eingefügt. Für sie werden nach russischen Angaben eine Durchlässigkeit von  $1 \cdot 10^{-6}$  m/s und eine Öffnungsweite von 10 cm angenommen. Aufgrund ihrer großen Öffnungsweite müssen sie als Bereiche erhöhter Kluftdichte angesehen werden. Der Einfachheit wird im Nachfolgenden jedoch weiterhin von Klüften statt von Kluftbereichen gesprochen. Es wird zudem von einer kontinuierlichen Stoffquelle ausgegangen, die in der horizontal verlaufenden Kluft K1 mit einer Konzentration von 1 mg/l angenommen wird. Der eingetragene Stoff verhält sich konservativ wie ein Tracer, so dass er weder dem Prozess der Sorption noch einer Konzentrationsänderung durch Zerfall oder Abbau unterliegt. Eine Übersicht der Modelleingangswerte enthält Tab. 5.

Tab. 5: Parametrisierung der unterschiedlichen Matrix-Varianten, für die jeweils der Einfluss aller drei Kluftgeometrien untersucht wird.

Parameter	Matrix-Variante 1	Matrix-Variante 2	Matrix-Variante 3
Hydraulisches Potential	$6 \cdot 10^{-2}$		
Stoff-Quelle [mg/l]	kontinuierlich 1.0		
Matrix: $K_f$ -Wert [m/s]	$6 \cdot 10^{-8}$ (Mittelwert)	$1 \cdot 10^{-9}$	$5 \cdot 10^{-11}$ (Median)
Kluft: $K_f$ -Wert [m/s]	$1 \cdot 10^{-6}$		
Kluft: Öffnungsweite [m]	0.1		

## Modellergebnisse

Die Variation der Matrixdurchlässigkeit zeigt, dass das Kluftsystem erst ab einem gewissen Durchlässigkeitsunterschied zwischen Matrix und Kluft als bevorzugter Transportpfad genutzt wird. Die Ergebnisse der Matrix-Variante 1 für die drei Kluftvarianten, deren Matrix- und Kluftdurchlässigkeit sich um etwa zwei Potenzen unterscheiden, ähneln sich sehr stark. Der Durchlässigkeitsunterschied ist zu gering, als dass die Klüfte als bevorzugter Transportpfad genutzt würden. Es handelt sich daher um einen matrixdominierten Transport. In Abb. 34 sind daher lediglich die Ergebnisse der Tracer-Ausbreitung für die Matrix-Variante 1 nach 10, 20 und 30 Jahren, stellvertretend für die anderen beiden Kluftvarianten dargestellt.

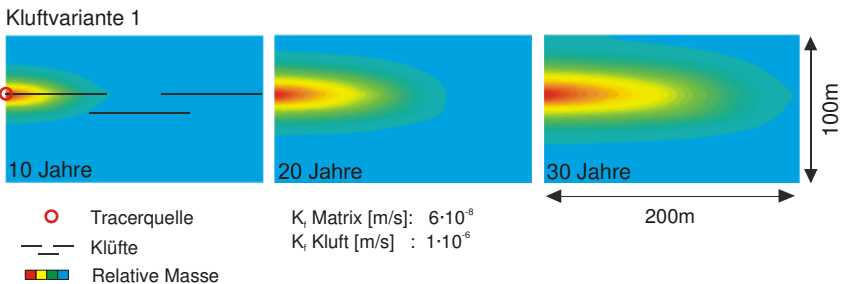


Abb. 34: Tracerausbreitung für die Matrix-Variante 1

In den Matrixvarianten 2 und 3, in der der Durchlässigkeitsunterschied um bis zu drei weitere Potenzen erhöht wird, werden die Klüfte dagegen bevorzugt für die Ausbreitung des Tracers genutzt, so dass es sich um einen kluftdominierten Transport handelt. Die verschiedenen Kluftvarianten führen daher zu unterschiedlichen Transportmustern und der Ausbildung verschiedener Ausbreitungsfahnen, vgl. Abb. 35. Der Transport innerhalb der Klüfte erfolgt advektiv und aufgrund ihrer hohen Durchlässigkeit sehr schnell. In der engen Umgebung und an blind auslaufenden Klüften diffundiert der Tracer in Abhängigkeit der Matrix-Durchlässigkeit unterschiedlich schnell und tief in das Gestein hinein.

Dabei gilt:

- Je höher die Matrix-Durchlässigkeit, desto weiter dringt der Tracer in das Gestein und hat im Hinblick auf den Gesamttransport längere Verweilzeiten und ein starkes Tailing zur Folge.
- Anders als der advective Transport innerhalb der Klüfte, der bevorzugt in die Grundwasserströmungsrichtung erfolgt, führt der diffusive Transport auch zu einer transversalen Ausbreitung des Tracers. Dieser erfolgt um ein Vielfaches langsamer als der advective Stofftransport innerhalb der Klüfte.
- Eine konstante Stoffquelle führt aufgrund der Advektions- und Diffusionsprozesse im Laufe der Zeit zu der Bildung einer Ausbreitungsfahne, deren Breite in Beziehung zum Versatz der für den Transport genutzten Klüfte bzw. der Länge der Querkluft steht sowie von den hydraulischen Eigenschaften der Gesteinsmatrix und der genutzten Klüfte abhängt.



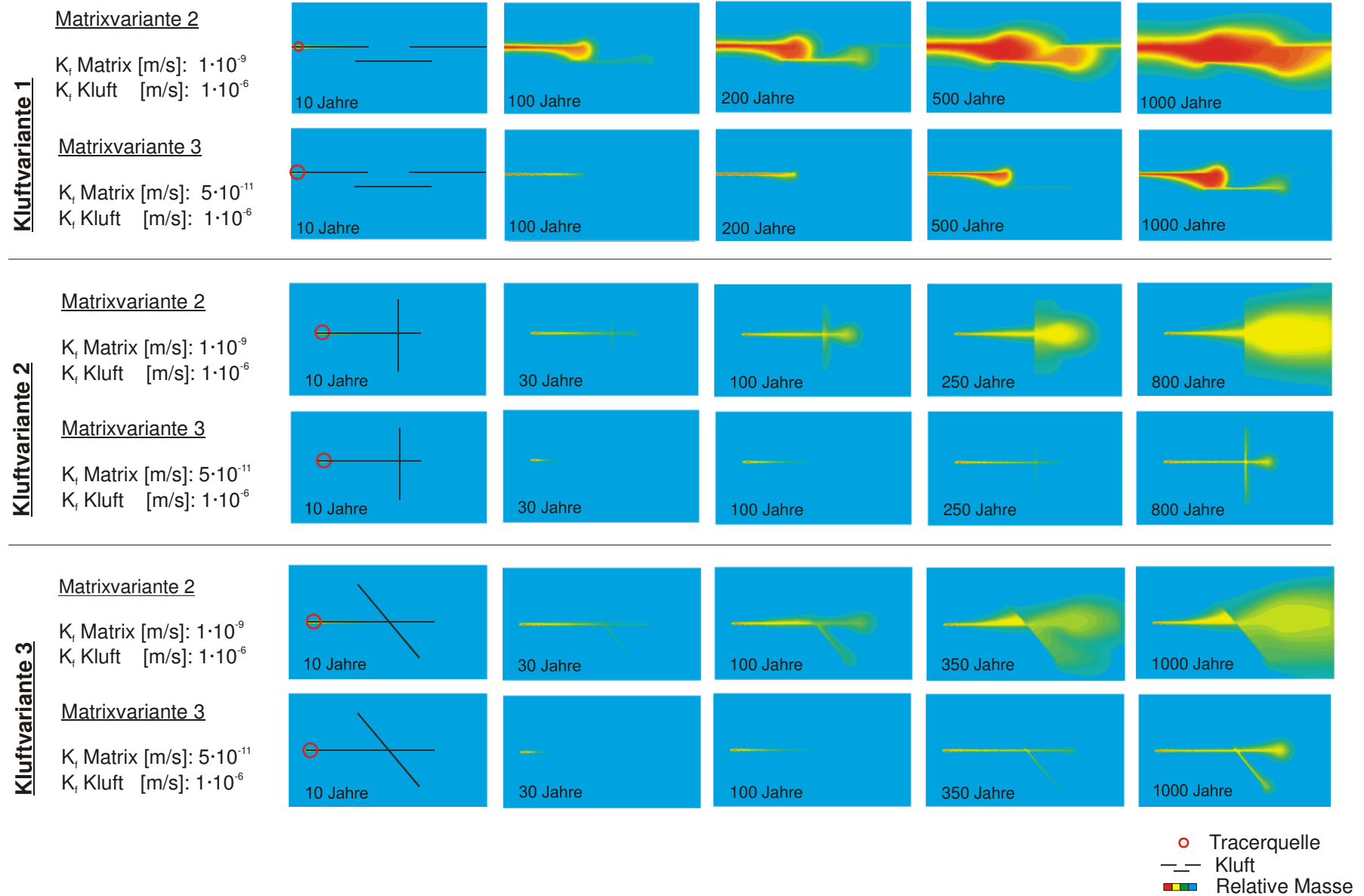


Abb. 35: Ausbreitung eines konservativen Tracers für zwei verschiedene Matrixdurchlässigkeiten im Bereich unterschiedlich orientierter Klüfte



## 4.2. Regionales 3d-Strömungsmodell

Das regionale dreidimensionale Strömungsmodell wird erstellt, um das großräumige Grundwasserströmungsfeld innerhalb des Untersuchungsgebietes nachzubilden. Das hydrogeologische Strukturmodell sowie die Ergebnisse der Strömungsmodellierung bilden die Grundlage für die im Anschluss durchgeführten zweidimensionalen Modellrechnungen.

### Modellaufbau

Das Modellgebiet wird so gewählt, dass es überschlüssig ein, für die zur Zeit geplante Endlagerung genügend großes und hydrogeologisch geeignetes Areal beinhaltet. Die Auslegungsrechnungen des Endlagers wurden im Rahmen des Projektes „ASTER“ durchgeführt /WAL 05/. Desweiteren wird vorausgesetzt, dass der potenzielle Einlagerungsbereich eine ausreichend große Entfernung zu den vorhandenen Störungszonen aufweist, da davon ausgegangen werden muss, dass diese bevorzugte Grundwasserströmungspfade darstellen. Ein Sicherheitsabstand von 500 m zwischen Endlagerbereich und Störungszonen wird als geeignete Entfernung angesehen, um eine hydraulische Beeinflussung auf das potenzielle Endlagergebiet weitgehend auszuschließen. Diese Annahme verringert den in Frage kommenden Bereich deutlich und zeigt, dass der südwestlich gelegene Teil des Gebietes Itatskij am ehesten für eine Endlagerung in Betracht kommt, vgl. Abb. . Für den eigentlichen Einlagerungsbereich wird dort eine Fläche von etwa  $1,5 \text{ km}^2$  in einem Gesteinsblock ausgewiesen, der nach jetziger Erkenntnis weitgehend ungestört erhalten ist.

Die Abgrenzungen des Modellgebietes erfolgt in nördlicher und östlicher Richtung durch Störungszonen, in Richtung Süden durch hydraulisch weniger bedeutende Klüfte. Nach Westen wird es durch eine Grundwasserscheide begrenzt. Für das Modellgebiet ergibt sich damit eine Fläche von etwa  $11 \text{ km}^2$ , vgl. Abb. 36.

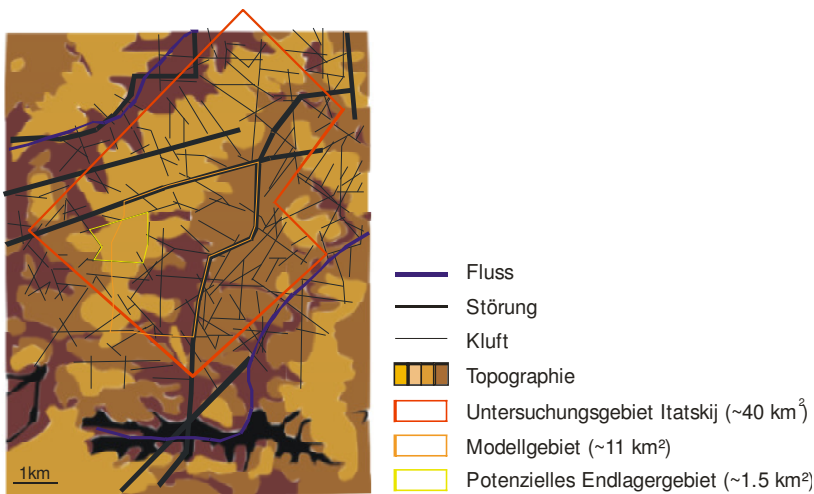


Abb. 36: Modellgebiet (orange) und potenzieller Endlagerbereich (gelb) im Gebiet Itatskij (rot)

Auf Grundlage des verfügbaren Kartenmaterials werden in das Modellgebiet 33 Klüfte in Form quadrilateraler zweidimensionaler Elemente eingefügt, vgl. Abb. 37 /AND 93/. Die Neigung der Klüfte wird vereinfacht mit 90° angenommen /AND 93/.

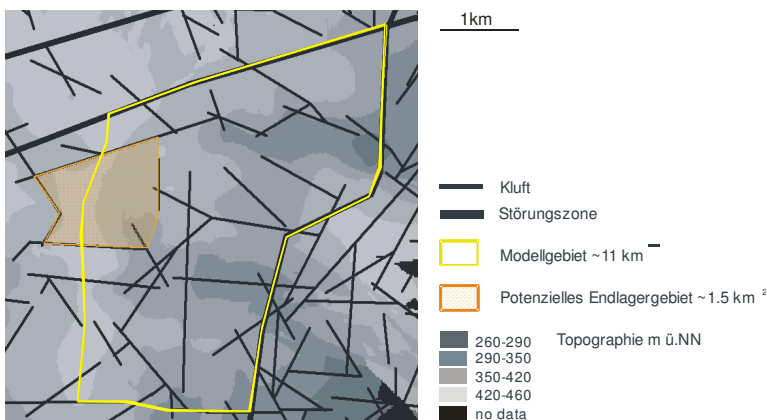


Abb. 37: Modellgebiet mit Topographie und modellierten Klüften /AND 93/, /AND 98/

Die Vermaschung des Modellgebietes wird im Bereich der hydraulisch wirksamen Kluftbereiche verfeinert, da dort ein großer Konzentrationsgradient erwartet wird und numerische Stabilität gewährleistet werden muss. Insgesamt enthält das Modell mehr als 400 000 Elemente. Die vertikale Unterteilung bis in 1 000 m Tiefe erfolgt mit Hilfe von acht Modellebenen, sogenannten Slices, die der Abgrenzung der hydrogeologischen Einheiten dienen, die Tiefenlage des Endlagergebietes ausweisen oder eingebracht wurden, um numerische Stabilität zu gewährleisten.

Die Abfolge der lithologischen Schichten wird basierend auf den vorhandenen Gebietsdaten aus geoelektrischen Untersuchungen und Bohrkernen aus den Gebieten Kamennij und Itatskij vorgenommen und in drei Gesteinszonen eingeteilt /AND 93/:

- Zone 1 enthält mit dem proterozoischen Granitoiden das Ausgangsgestein, das bis in etwa 1 km Tiefe nur eine geringe Überprägung erfahren hat und daher eine geringe Kluftdichte aufweist.
- Zone 2 enthält die bis zu 100 m mächtige Verwitterungszone.
- Zone 3 wird durch jurassische und holozäne Sedimente bis maximal 50 m Mächtigkeit gebildet.

Es wird davon ausgegangen, dass die das Ausgangsgestein überlagernden Schichten (Zone 2 und 3) in den höher gelegenen Bereichen aufgrund erosiver Umlagerungsprozesse von geringerer Mächtigkeit sind als in den Niederungen. Aufgrund der intensiven Klüftung innerhalb der Verwitterungszone wird weiterhin angenommen, dass es sich hier wie auch in den sich darüber befindlichen Sedimenten um homogene quasi-poröse Gesteine handelt.

Die hydraulischen Eigenschaften der drei Gesteinszonen sowie der Kluftigenschaften sind bisher nur ansatzweise bekannt. Die Gesteinsmatrix des Granitoids wird daher vereinfacht als poröses Medium mit geringen Durchlässigkeitsbeiwerten in dem Modell wiedergegeben. Die Aufnahme der größeren Klüfte erfolgt in Form diskreter Elemente mit einer höheren Durchlässigkeit. Bereiche großer Mikrokluftigkeit, wie kataklastischer Zonen werden als Bereiche homogener hydraulischer Eigenschaften in Form höherer Durchlässigkeiten der Gesteinsmatrix in die Modelle aufgenommen.

Die Grundwasserströmung innerhalb der Klüfte wird mit Hilfe des Darcy-Gesetzes beschrieben, vgl. Kapitel 2.3.1. Fehlende Daten werden im Wesentlichen mit Hilfe von Messdaten aus dem Schweizer Felslabor Grimsel ergänzt /NAG 94/. Die im Modell genutzten Durchlässigkeitsbeiwerte für die verschiedenen Gesteinsstrukturen sind in Tab. 6 zusammengefasst.

Tab. 6: Durchlässigkeitsbeiwerte der im 3d-Modell genutzten Gesteinsschichten

Hydrogeologische Struktur	Durchlässigkeitsbeiwert [m/s]	
	Matrix	Klüfte
Sediment	$1 \cdot 10^{-6}$	–
Verwitterungszone	$6 \cdot 10^{-8}$	-
Kristallines Festgestein	$5 \cdot 10^{-11}$	$5 \cdot 10^{-11} - 1 \cdot 10^{-8}$

Die Topographie des Modellgebiets und seiner nahen Umgebung wird von dem zuvor auf Basis der vorhandenen Informationen erzeugten digitalen Geländemodell übernommen, vgl. Abb. 38. Die Geländehöhen belaufen sich auf Werte zwischen 250 m ü.NN und 450 m ü.NN.

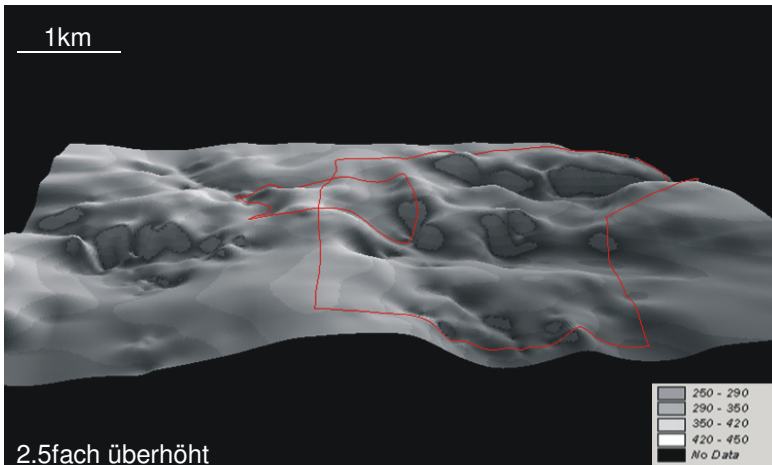


Abb.38: Digitales Geländemodell mit Modellgebiet sowie einem weitgehend ungestörten Gesteinsblock als potenzielles Endlagergebiet

Die Grundwasseroberfläche wiederholt in geglätteter Form das Relief und wurde gemäß der vorliegenden Berichte u.a. /AND 98/ und auf der Grundlage des digitalen Geländemodells als Freispiegelfläche erzeugt. Die Grundwasserspiegelhöhen belaufen sich auf Werte zwischen 20 m u.GOK und 30 m u.GOK im Bereich der Grundwasserscheide und 2 m u.GOK bis 10 m u.GOK in den Niederungen. Der Grundwasserstand fällt damit von Westen nach Osten hin ab und gibt die Grundwasserströmungsrichtung vor.

Die Grundwasserneubildung wird aus den vorhandenen Niederschlags- und Evapotranspirationsdaten abgeschätzt, beläuft sich in etwa auf 2·10<sup>-4</sup> m/d und wird über das gesamte Gebiet als ein im zeitlichen Verlauf konstanter Wert angenommen.

Als hydraulische Randbedingung wird die Dirichlet-Bedingung gewählt und mit den Grundwasserhöhen entsprechend der Grundwasseroberfläche belegt. Der untere Modellrand markiert den Übergang zu noch undurchlässigeren Schichten des granitoiden Festgesteins und wird für einen Grundwasserein- bzw. -ausstrom als undurchlässig angenommen.

## Modellergebnisse

Das Modell liefert aus den rekonstruierten Grundwasserspiegelständen zunächst eine Vorstellung über das regionale Grundwasserregime. Das Grundwassergefälle verläuft im Wesentlichen von West nach Ost und zeichnet das Oberflächenrelief in abgeschwächter Form nach, vgl. Abb. 39 (a).

Die Grundwasserströmung innerhalb des geklüfteten Gesteins unterscheidet sich erwartungsgemäß erheblich von derjenigen der ihn überdeckenden quasi-porösen Grundwasserleiter. Aufgrund der großen Durchlässigkeitsdifferenz zwischen Gesteinsmatrix und Kluftsystem bilden die Klüfte in ihm den wesentlichen Strömungspfad. Die von der Wasserscheide im Westen zugeführten Wassermengen werden von dem Kluftsystem aufgenommen und in östlicher Richtung weitergeleitet. Bei Betrachtung der Kluftströmung fällt auf, dass diese nicht in allen Bereichen gleich groß ist und einige Abschnitte stärker durchströmt werden als andere. Der Grund dafür ist ihre Orientierung im Hinblick auf die Strömungsrichtung des Grundwassers sowie die Konnektivität der Klüfte untereinander. Sind sie in West-Ost Lage in Richtung der Grundwasserfließrichtung ausgerichtet, werden sie stark durchströmt, während in denjenigen, die quer zur Grundwasserfließrichtung angeordnet sind kaum oder keine Durchströmung stattfindet, vgl. Kapitel 4.1. In Abb. 39 (b) wird die Kluftströmung in Form schwarzer Pfeile, stagnierendes Grundwasser mit Hilfe gestrichelter Linien dargestellt.

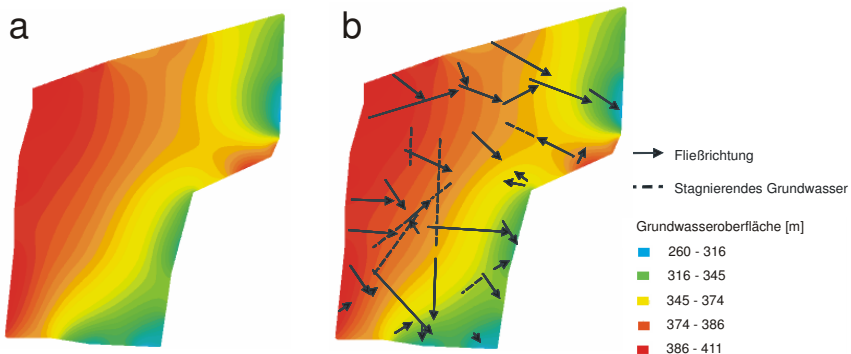


Abb.39: Modellierter Grundwasserströmung innerhalb der porösen Deckschichten (a) und des geklüfteten Gesteinsbereichs (b)



In Abb. 40 werden die Grundwassergleichen innerhalb der Verwitterungszone (blau) mit denjenigen im Festgestein (rot) in Form von Grundwassergleichenplänen gegenübergestellt. Deutlich wird der Einfluss des Kluftsystems anhand der stark veränderten Grundwassergleichen sichtbar. Innerhalb der Klüfte wird die Strömung erheblich beschleunigt, wohingegen im intakten Gestein kaum eine nennenswerte Grundwasserströmung stattfindet.

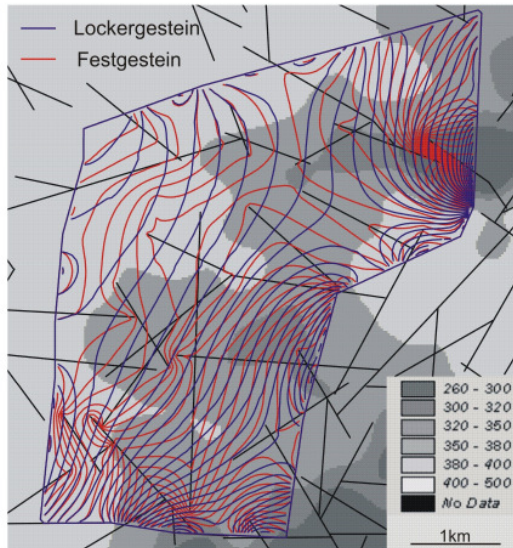


Abb. 40: Gegenüberstellung der Grundwassergleichen im Locker- (blau) und Festgestein (rot). Im Hintergrund die topographische Karte mit Geländehöhen zwischen 260 m ü.NN und 500 m ü.NN

### **4.3. Lokales 2d Strömungs- und Transportmodell**

Mit Hilfe zweidimensionaler Strömungs- und Transportmodellen erfolgt

- die Untersuchung der Auswirkung und Relevanz unterschiedlicher Kluftigenschaften wie ihrer Neigung und Dichte auf die Grundwasserströmung sowie der zeit- und ortsabhängigen Konzentrationsverteilung eines Tracers im Modellgebiet.
- die Einschätzung der Relevanz der Durchlässigkeitsbeiwerte von Klüften und Matrix sowie der Kluftöffnungsweite auf die zeit- und ortsabhängige Konzentrationsverteilung im Modellgebiet.
- die Untersuchung des Einflusses eines natürlichen zeit-unabhängigen und eines durch den radioaktiven Zerfall der Abfälle künstlich erzeugten und nur vorübergehend wirkenden Wärme-feldes auf die zeit- und ortsabhängige Konzentrationsverteilung im Modellgebiet.

Für alle Modellrechnungen wird ein aus dem dreidimensionalen Regionalmodell erstellter Profilschnitt verwendet. Das daraus erstellte Strömungsmodell wird im Anschluss schrittweise um den Tracer- und Wärmetransport erweitert.

### 4.3.1. Modellierung ohne Wärmegradient

#### Modellaufbau

Der dem Modell zugrunde liegende Profilschnitt verläuft entlang der Grundwasserströmungsrichtung vom zentralen Teil des potenziellen Endlagergebiets im Bereich der Wasserscheide im Westen in eine östlich gelegene Niederung, vgl. Abb. 41. Der Profilschnitt besitzt eine Länge von etwa 2 km und eine Tiefe von rund 1.5 km. In seinem Verlauf werden mehrere Klüfte gekreuzt.

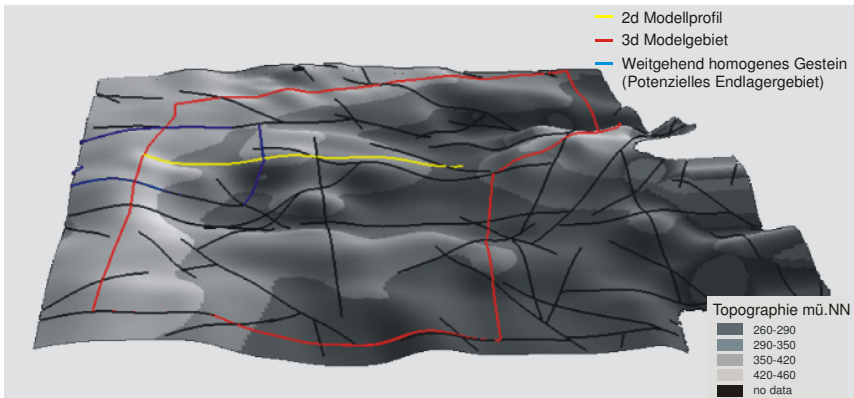


Abb. 41: Digitales Geländemodell mit Kluftsystemen (schwarz), dem dreidimensionalen Modellgebiet (rot), dem Modellprofil (gelb) sowie dem potenziellen Endlagergebiet (blau)

Das in Abb. 42 (links) dargestellte hydrogeologische Strukturmodell zeigt die in der Modellierung aufgenommenen Gesteinsstrukturen. Deutlich sind die verschiedenen lithologischen Zonen in Form des von porösen Deckschichten (blau) überlagerten geklüfteten Festgesteins (beige) zu erkennen. Die Verwitterungszone wird in dem Modell als quasi-poröse Zone behandelt. Im östlichen Niederungsbereich wird sie von einer sedimentären Deckschicht überlagert. Das darunter befindliche Grundgebirge wird von Klüften unterschiedlicher Orientierung und Dichte in verschieden große Gesteinsblöcke unterteilt.

In das Strukturmodell werden je zwei nahezu vertikal und horizontal verlaufende Einzelklüfte (vEK 1/2, hEK 1/2) in Form eindimensionaler Elemente sowie zwei in vertikaler Ausrichtung intensiv geklüftete Zonen (vKZ 1/2) unterschiedlicher Mächtigkeit und Kluftdichte implementiert, vgl. Abb. 42 (rechts). Diese intensiv geklüfteten Bereiche werden aufgrund des gewählten Maßstabs sowie der fehlenden geologischen Informationen nicht explizit betrachtet. Die mikroskaligen Inhomogenitäten dieser beiden Zonen werden daher als quasi-poröse Matrix erhöhter hydraulischer Leitfähigkeit in das Modell eingebracht.

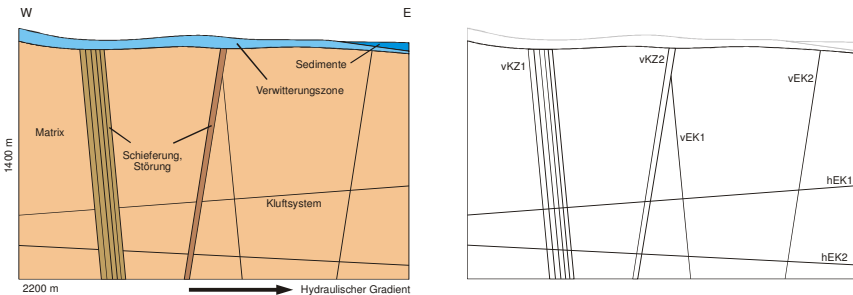


Abb. 42: Hydrogeologisches Strukturmodell (links) und Kluffbenennung (rechts) innerhalb des zweidimensionalen Modellgebietes

Das etwa 3 km<sup>2</sup> große Modellgebiet wird mit einem Finiten-Elemente Netz vermascht, das aus etwa 61 000 Elementen besteht. Im Umfeld der Klüfte werden hohe Konzentrationsgradienten erwartet, so dass in diesem Bereich ein feineres Gitternetz erzeugt wird, um numerische Stabilität zu gewährleisten, vgl. Abb. 43.

Die Belegung der geologischen Strukturen mit Durchlässigkeitsbeiwerten erfolgt auf der Grundlage der russischen Originaldaten. In Tab. 7 sind die entsprechenden Modelleingaben zusammengestellt.

Tab. 7: Modelleingabe für die Durchlässigkeit der verschiedenen hydrogeologischen Strukturen

Hydrogeologische Strukturen	Durchlässigkeitsbeiwert [m/s]	
	Modelleingabe	
	Matrix	Kluft
Sediment	$1 \cdot 10^{-6}$	-
Verwitterungszone	$6 \cdot 10^{-8}$	
Kristallines Festgestein	$5 \cdot 10^{-11}$	$7 \cdot 10^{-5}$ bzw. $6 \cdot 10^{-7}$
vKZ 1	$4 \cdot 10^{-8}$	
vKZ 2	$5 \cdot 10^{-8}$	

Die nahezu vertikal verlaufenden Klüfte weisen Neigungen zwischen  $80^\circ$  und  $95^\circ$  auf. Der Grundwasserstand fällt von Westen nach Osten hin ab und gibt damit die Grundwasserströmungsrichtung vor.

Als linke und rechte Modellbegrenzung wird die Dirichlet-Randbedingung gewählt und mit Grundwasserhöhen belegt, welche aus dem dreidimensionalen Regionalmodell abgeleitet werden, vgl. Kapitel 4.2. Der untere Modellrand markiert den Übergang zu noch undurchlässigeren Gesteinsschichten und wird für einen Grundwasserein- bzw. -ausstrom als undurchlässig angenommen, vgl. Abb. 43.

Als Grundwasserneubildung wird wie schon im vorigen dreidimensionalen Modell ein im zeitlichen Verlauf konstanter, über das gesamte Gebiet gleichmäßig verteilter Wert von  $1.64 \cdot 10^{-4}$  m/d aus den vorhandenen Niederschlags- und Evapotranspirationsdaten abgeschätzt, vgl. Abb. 43.

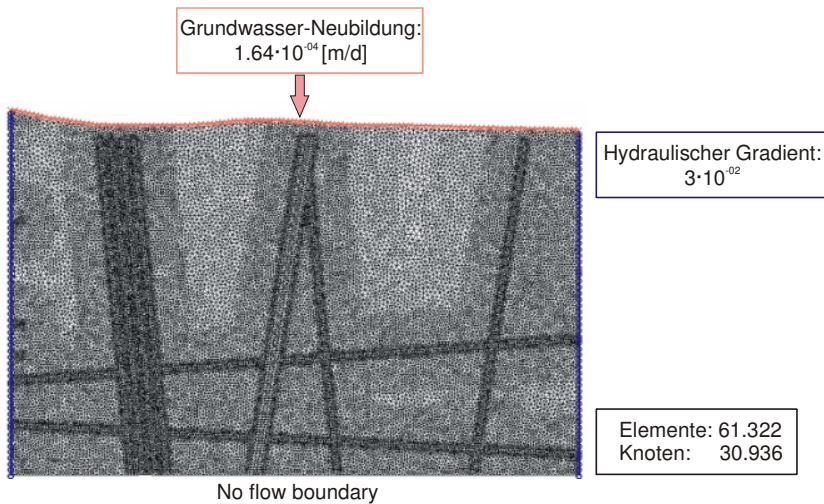


Abb. 43: Das vermaschte zweidimensionale Modell mit hydraulischen Randbedingungen

Um den Einfluss unterschiedlich ausgebildeter Kluftsysteme auf das Strömungsfeld zu untersuchen, wird das Modell in drei verschiedenen Varianten gerechnet. Abb. 44 zeigt auf der linken Seite ihre hydrogeologischen Strukturmodelle. In der ersten Variante wird ganz auf die Eingabe von Klüften verzichtet und lediglich die sich einstellende Strömung im homogenen Gesteinskomplex berechnet. Version 2 beinhaltet die oberflächennahen porösen Deckschichten sowie die erhöhte Durchlässigkeit in den beiden stark geklüfteten und mehr oder weniger vertikal angeordneten Kluftbereichen vKZ1/vKZ2. In Version 3 kommen die diskreten vertikalen und horizontalen Einzelklüfte hinzu, deren Öffnungsweite und Durchlässigkeit unterschiedliche Werte zugewiesen werden.

Die Ergebnisse der Grundwasserströmungsmodellierung werden in Abb. 44 dargestellt. Anhand der Ausbildung der hydraulischen Potentiallinien werden die unterschiedlichen Fließgeschwindigkeiten und -richtungen innerhalb des Modellgebiets erkennbar.

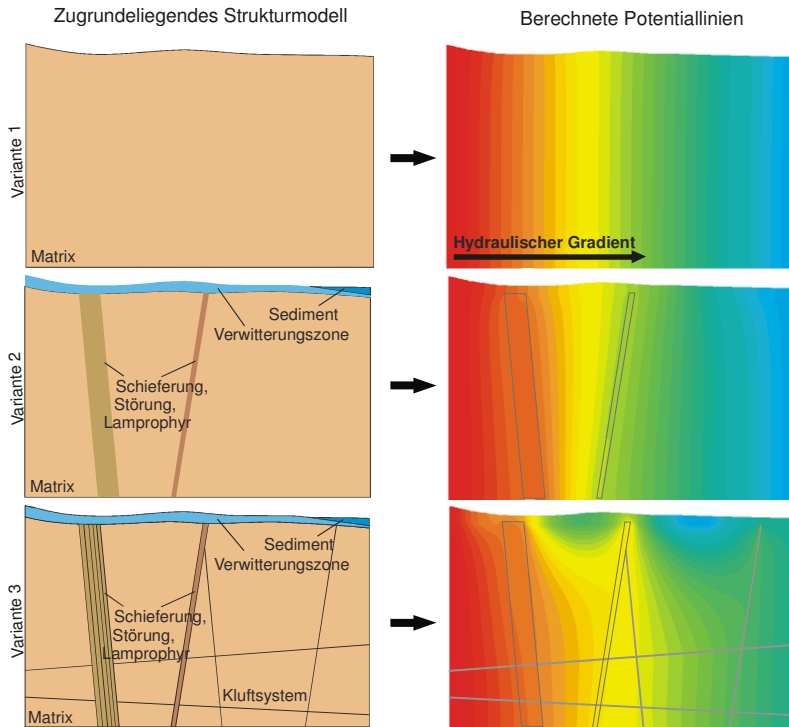


Abb.44: Grundwasserströmung in Abhängigkeit unterschiedlicher Kluffstrukturen

Die **erste Modellvariante** enthält das homogene Gestein ganz ohne Klüfte und Kluftzonen. Gemäß dem hydraulischen Gefälle bildet sich von links nach rechts eine gleichmäßige Grundwasserströmung aus, die anhand der parallelen Potentiallinien deutlich wird, vgl. Abb. 44 (oben rechts).

Die **zweite Modellvariante** beinhaltet das homogene Gestein sowie die erhöhte Durchlässigkeit innerhalb der porösen Deckschichten und der beiden vertikalen Gesteinsbereiche mit erhöhter Kluftdichte  $vKZ1/2$ . Diese Bereiche werden erwartungsgemäß stärker durchströmt als das sie umgebende intakte und weniger durchlässigere Gestein, wodurch in dem zuvor gleichmäßig ausgebildeten Strömungsfeld leichte Unregelmäßigkeiten sowohl in der Fließgeschwindigkeit als auch in der Strömungsrichtung verursacht werden. Dies wird an den leicht gekippten Potentiallinien deutlich, vgl. Abb. 44 (mitte rechts).

In der **dritten Modellvariante** führt das Hinzufügen der diskreten eindimensionalen Fließwege in Form der vertikal und horizontal angeordneten Einzelklüfte  $vEK1/2$ ,  $hEK1/2$  zu einer deutlich sichtbaren Veränderung des Strömungsfeldes, vgl. Abb. 44 (unten rechts). In dem Bereich der horizontal ausgerichteten Klüfte führt die advective Kluftströmung zu einer deutlich erhöhten Fließgeschwindigkeit. Die steil einfallenden Klüfte  $vEK1/2$  führen dagegen das Grundwasser vermehrt in Richtung Geländeoberfläche ab. Dadurch werden das bisherige Strömungsfeld und auch der Abstrom innerhalb der porösen Deckschichten erheblich verändert.

Eine nähere Betrachtung der Modellergebnisse zeigt, dass sich die Geschwindigkeitsverteilung innerhalb der Klüfte in Abhängigkeit ihrer Durchlässigkeit sowie Öffnungsweite und ihres Einfallswinkels sehr unterschiedlich gestaltet, vgl. Abb. 45. Die horizontalen Klüfte, die in Richtung des hydraulischen Potentials angeordnet sind, weisen grundsätzlich höhere Fließgeschwindigkeiten auf als diejenigen, die entgegen dem Gefälle angeordnet sind, vgl. Kapitel 4.1.

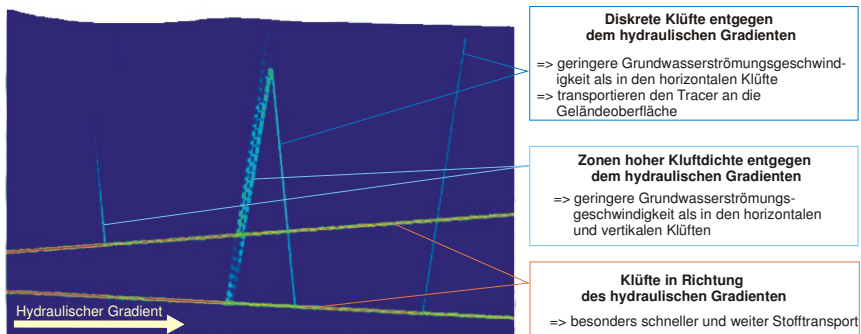


Abb. 45: Modellierter Grundwasserströmungsgeschwindigkeiten innerhalb des Gesteinssystems



Können die horizontalen Klüfte hEK1/2 aufgrund ihrer Durchlässigkeit und Öffnungsweite die anfallende Grundwassermenge abführen, so erfolgt der Grundwasserabstrom mit hoher Geschwindigkeit bevorzugt in diesen Strukturen.

Sind die horizontalen Klüfte hEK1/2 nicht in der Lage, das anfallende Grundwasser aufgrund zu geringer Durchlässigkeit oder erhöhtem Wasservolumen vollständig abführen, führt dies zu einem Druckaufbau innerhalb dieser Klüfte. Dadurch werden auch die mit ihnen in Kontakt stehenden vertikalen Klüfte, welche nicht so günstig in Abstromrichtung orientiert sind, intensiver in das Strömungsgeschehen einbezogen. Aufgrund der Druckverteilung auf das Gesamtsystem, nimmt die Fließgeschwindigkeit innerhalb der horizontalen Klüfte hEK1/2 wieder ab. Der Druckabfall ist umso größer, je höher Ihre Konnektivität zu anderen Klüften ist.

In den Zonen erhöhter Kluftdichte kann zusätzlich beobachtet werden, dass die in ihnen stattfindende Strömungsgeschwindigkeit mit zunehmender Kluftdichte und Konnektivität abnimmt. Der Bereich wird schließlich unter Aufgabe der diskreten Fließwege nahezu homogen durchströmt und ähnelt immer mehr der Strömung in einem porösen Gestein.

Ein interessantes Strömungsphänomen ist in der Kluftzone vKZ2 und der Einzelkluft vEK1 zu beobachten. Innerhalb der vertikalen Kluftzone nimmt der Wasserdruck schwerkraftbedingt mit der Länge der zurückgelegten Strecke so stark ab, dass das zunächst aufsteigende Grundwasser durch die Verbindung mit der Einzelkluft seine Fließrichtung ändert und in dieser schwerkraftbedingt wieder in die Tiefe strömt.

Neben dem Durchlässigkeitsbeiwert bestimmt die Öffnungsweite der Klüfte durch den vorgegebenen Fließquerschnitt maßgeblich die Strömungsgeschwindigkeit innerhalb der Klüfte. So führt eine Halbierung ihrer Öffnungsweiten bei einer Kluftdurchlässigkeit von  $7 \cdot 10^{-5}$  m/s zu einer Beschleunigung des ersten Traceraustritts um 1.5 Jahre.

Eine Verringerung der Kluftdurchlässigkeit in den Klüften auf  $7 \cdot 10^{-7}$  m/s führt durch die Verlangsamung der Strömungsgeschwindigkeit zu einer erheblichen Verzögerung des Stofftransportes. Der Zeitpunkt des ersten Traceraustritts verschiebt sich dadurch z.B. in der vertikalen Kluftzone vKZ1 von etwa 5 Jahren auf 50 Jahre. Zudem verringert sich die maximale Austrittskonzentration um zwei Größenordnungen. Die höchsten austretenden Stoffkonzentrationen werden unabhängig von der Parameterbelegung im Umfeld des engen Kluftbereiches vKZ2 angetroffen.

### **4.3.2. Modellierung mit Wärmegradient**

Die Modelle werden auf der Basis des Strömungsmodells der Variante 3 aus Kapitel 4.3.1 erstellt, vgl. Abb. 44. Die hydraulischen Daten des Strömungsmodells werden in einem ersten Schritt um die wärmespezifischen Parameter der Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit für die Trägermedien Wasser und Gestein sowie die Wärmerandbedingung erweitert, vgl. Abb. 46 und Tab. 8. In einem zweiten Schritt wird ein zeitunabhängiger Quellterm eines Tracers in das Modell aufgenommen. In beiden Modellen werden die Kluftdurchlässigkeiten verändert, in den Tracertransportrechnungen zusätzlich die Kluftöffnungsweite und der Wärmegradient verändert.

Das Hauptaugenmerk liegt auf einer möglichen Veränderung der Transportwege, der benötigten Zeit für einen ersten Traceraustrag sowie der maximal auftretenden Stoffkonzentration innerhalb der verschiedenartigen Klüfte und Kluftzonen im Vergleich zu der Rechnung ohne geothermischen Tiefengradienten, vgl. Kapitel 4.3.1.

#### **4.3.2.1. Natürlicher geothermischer Wärmegradient**

##### **Modellaufbau**

Den durchgeführten Rechnungen liegt der natürlich vorkommende geothermische Tiefengradient zu Grunde. Dieser nimmt in der Regel einen Wert von etwa 3°C pro 100 m an und wird durch die hohe Temperatur des Erdkerns hervorgerufen, die auf über 6 000°C geschätzt wird. Der geothermische Tiefengradient wird in Form einer zeitunabhängigen Wärmerandbedingung in das Modell aufgenommen. Die Belegung des oberen Modellrandes mit einer Temperatur von 2°C erfolgt auf der Grundlage der Jahresmitteltemperatur in Bodennähe. Dem unteren Modellrand in 1 400 m Tiefe wird ein Wert von etwa 49°C bzw. 55°C zugewiesen, um den im Untersuchungsgebiet ermittelten Wärmegradienten von 3 bzw. 4°C pro 100 m /ZIE 04/, /RUS 96/ zu entsprechen.

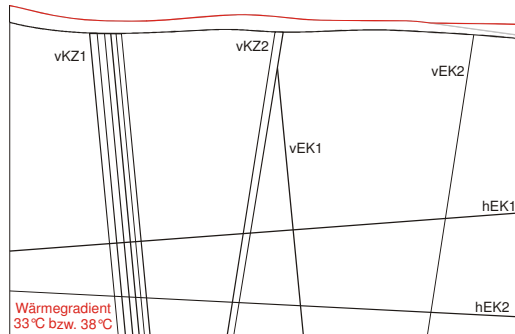


Abb. 46: Hydrogeologisches Strukturmodell mit der Wärmerandbedingung für die Nachbildung des natürlichen geothermischen Wärmegradienten

Die Werte der Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit entstammen Literaturdaten. Wasser besitzt mit etwa  $4,2 \text{ J/m}^3 \cdot \text{K}$  eine im Vergleich zu festen Trägermedien hohe spezifische Wärmekapazität und mit  $0,6 \text{ W/m} \cdot \text{K}$  eine sehr geringe Wärmeleitfähigkeit. Das bedeutet, dass es vergleichsweise viel Energie aufnehmen und nur deutlich verzögert weitergeben kann. Im Unterschied dazu nimmt das Gestein mit einer spezifischen Wärmeleitfähigkeit von etwa  $2,2 \text{ J/m}^3 \cdot \text{K}$  deutlich weniger Wärme auf und gibt diese sehr schnell wieder an seine Umgebung ab.

Tab. 8: Modelleingabe der wärmespezifische Parameter von Wasser und Festgestein /DIE 04/

	Spez. Wärmekapazität [ $10^6 \text{ J/m}^3 \cdot \text{K}$ ]	Wärmeleitfähigkeit [ $\text{W/m} \cdot \text{K}$ ]
Wasser	4,17	0,60
Gestein	2,14	2,90

Im Anschluss an die Modellierung des sich ausbildenden Wärmefeldes wird eine Tracertransportrechnung durchgeführt. Für diese Rechnung wird ein zeitunabhängiger Tracer als Quellterm gewählt, dessen Rückhaltung durch Sorption und/oder Verlangsamung in Folge chemischer Reaktionen zu vernachlässigen ist. Sein Eintrag erfolgt in die horizontal verlaufende Kluft hEK1 in der Nähe des linken Modellrandes.

## Modellergebnis

Die **Ausbildung des Wärmefeldes** zeigt eine deutliche Abhängigkeit von der Kluftdurchlässigkeit. Innerhalb des ungestörten Gebirgsbereichs wirkt sich aufgrund des geringen Wassergehalts vor allem die Wärmeleitfähigkeit des Gesteins auf das Wärmefeld aus. Innerhalb des Kluftsystems speichert das Grundwasser dagegen einen Großteil der vorhandenen Wärme und gibt diese aufgrund seiner hohen spezifischen Wärmekapazität nur stark verzögert an seine Umgebung ab. Die im Wasser gespeicherte Wärme wird daher über weite Strecken mittransportiert. Findet innerhalb des Kluftsystems eine schnelle Grundwasserströmung statt, so wird die Wärme in diesem schneller transportiert als in dem sie umgebenden Gebirgsbereich und es bilden sich Inhomogenitäten innerhalb des Wärmefeldes aus. Diese machen sich vor allem in den Klüfte vKZ2/vEK1/2 bemerkbar, vgl. Abb. 47 (a). Innerhalb der Einzelkluft vEK1 zeigt sich das bereits in Kapitel 4.3.1 angesprochene Phänomen der abwärts gerichteten Kluftströmung, wodurch kälteres Oberflächenwasser in größere Tiefen gelangt und dort zu einer Temperaturabnahme in seinem Umfeld führt. In einem nahezu homogenen Gesteinsbereich, in dem sich die Durchlässigkeitsbeiwerte von Klüften und Gesteinsmatrix nur wenig voneinander unterscheiden wird dagegen ein weitgehend homogenes Wärmefeld mit parallel zur Geländeoberfläche verlaufenden Isothermen ausgebildet, vgl. Abb. 47 (b).

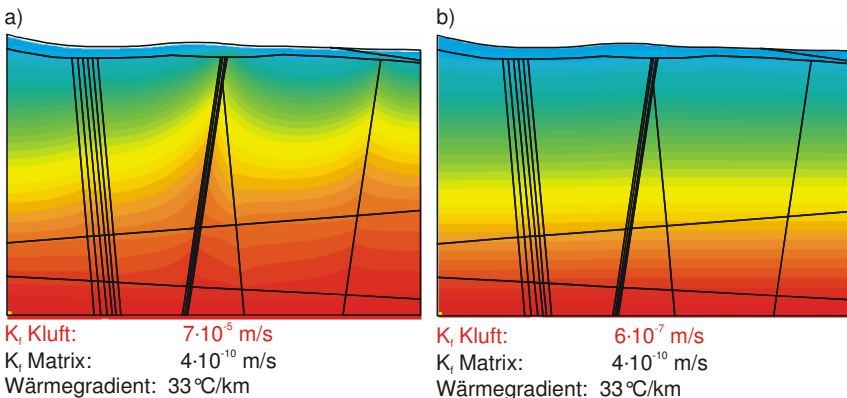


Abb. 47: Ausprägung unterschiedlicher Wärmefelder in Abhängigkeit der Kluftdurchlässigkeit

Das **Ergebniss der Tracertransportmodellierung** wird in Abhängigkeit der Kluftdurchlässigkeit und –öffnungsweite sowie des Wärmegradienten dargestellt. Wie die Wärme, so wird auch der in die horizontale Einzelkluft hEK1 eingegebene Tracer mit der Grundwasserströmung innerhalb der Kluftstrukturen mittransportiert.

Eine Halbierung der Öffnungsweite der Klüfte bewirkt dabei eine Beschleunigung des ersten Austrittszeitpunktes. Die höchsten Konzentrationen werden wie schon zuvor in den Bereichen erhöhter Kluftdichte vKZ1/vKZ2 erreicht, die geringsten in der Einzelkluft vEK2.

Abb. 48 zeigt, wie sich der Tracertransport in Abhängigkeit der Kluftdurchlässigkeit unter Berücksichtigung eines geothermischen Tiefengradienten von  $33^\circ\text{C}/\text{km}$  zu verschiedenen Zeitpunkten darstellt. Es wird deutlich, dass eine Variation der Kluftdurchlässigkeit zu einer Veränderung der Transportgeschwindigkeit, des Transportweges sowie der Höhe der Matrixdiffusion führt. Die Relevanz der einzelnen Klüfte bei der Stoffausbreitung steht in direkter Abhängigkeit zu deren Geometrie, welche die Fließrichtung des Grundwassers und Austrittsstelle des Tracers vorgeben.

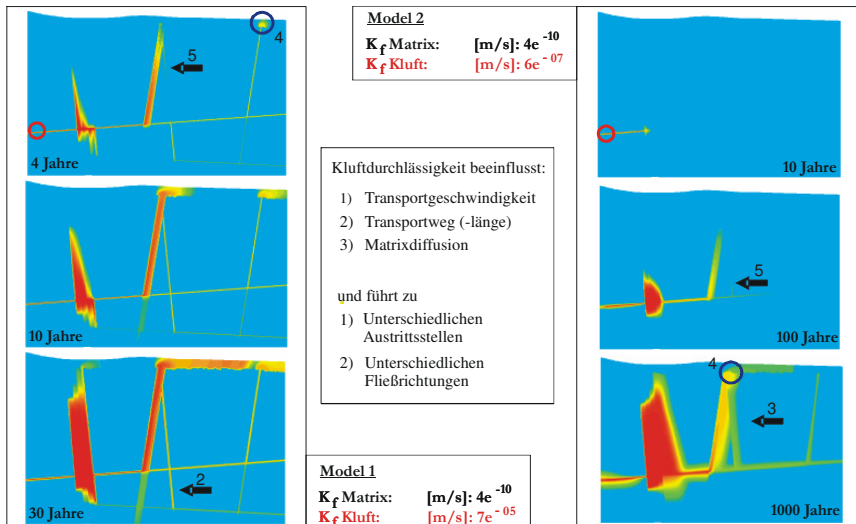


Abb. 48: Tracertransport in Abhängigkeit der Kluftdurchlässigkeit unter Berücksichtigung eines geothermischen Tiefengradienten von  $33^\circ\text{C}/\text{km}$

Weiterhin ist zu beobachten, dass sich der erste Austrittszeitpunkt für verschiedenartige Kluftstrukturen mit zunehmendem Wärmegradienten angleicht. Gilt für die Rechnung ohne Wärme noch der Zusammenhang „Je geringer die Kluftdichte, desto schneller der Transport“, ist dieser für die Rechnung mit einem Wärmegradienten von 33°C nur noch bedingt und für einen Wärmegradienten von 38°C nicht mehr gültig, vgl. Tab. 9.

Tab. 9: Zeitpunkt des ersten Traceraustritts in Jahren für eine Kluftdurchlässigkeit von  $7 \cdot 10^{-5}$  m/s

Kluft $K_f$ : $7 \cdot 10^{-5}$ m/s	Ohne Wärme	Wärmegradient: 33°C/km	Wärmegradient: 38°C/km
vKZ1	4,99 [a]	4,47 [a]	3,67 [a]
vVK2	4,47 [a]	3,67 [a]	
vEK2	3,67 [a]		

Insgesamt zeigen die Modellrechnungen, dass sich der Transportpfad gegenüber den Rechnungen ohne Wärme nicht verändert. Im Fall einer hohen Kluftdurchlässigkeit von  $7 \cdot 10^{-5}$  m/s findet der Transport noch immer unter Inanspruchnahme des gesamten Kluftsystems statt. Innerhalb des Kluftsystems erfolgt der Ausbreitungsprozess sehr schnell und auch in entfernt liegende Bereiche, wie der Einzelkluft vEK2. Im Fall der geringeren Kluftdurchlässigkeit von  $6 \cdot 10^{-7}$  m/s findet der Transport wie auch schon in der Modellierung ohne Wärmegradient nahezu vollständig in der horizontalen Kluft hEK1 und oberhalb von ihr vor allem innerhalb der beiden Bereiche hoher Kluftdichte vKZ1/2 statt, vgl. Abb. 48. Der Wärmegradient ist damit für die Auswahl des Transportweges nicht von Bedeutung.

Die Wärme nimmt jedoch Einfluss auf die erreichte maximale Stoffkonzentration sowie deren Austrittszeitpunkt in der Lockergesteinszone. Beispielsweise nimmt für die schnelle Kluftdurchlässigkeit von  $7 \cdot 10^{-5}$  m/s die Menge des Stoffaustrags in der engen Kluftschar vKZ2 mit steigender Wärme zu. Innerhalb der Kluft vEK2 werden die niedrigsten, in der engen Kluftschar vKZ2 die höchsten Konzentrationen erreicht.

Die Modellrechnungen weisen ebenfalls darauf hin, dass die Temperatur einen umso größeren Einfluss auf die Transportgeschwindigkeit hat, je höher die Kluftdichte ist. So hat die Temperaturänderung keine wesentlichen Auswirkungen auf die Strömungs-

geschwindigkeit der Einzelkluft  $v_{EK2}$ , während sie die Geschwindigkeit in dem Bereich erhöhter Kluftdichte  $v_{KZ1}$  mit zunehmender Temperatur beschleunigt. Diesen Zusammenhang zeigt Tab. 9 beispielhaft für eine Kluftdurchlässigkeit von  $7 \cdot 10^{-5}$  m/s.

#### 4.3.2.2 Sekundär erzeugtes Wärmefeld

Durch den radioaktiven Zerfall der eingelagerten Abfälle wird ein Wärmefeld erzeugt, welches den natürlichen geothermischen Tiefengradienten überprägt. Die Weiterentwicklung des in Kapitel 4.3.2.1. genutzten zweidimensionalen Modells soll Aufschluss darüber geben, inwieweit dadurch Veränderungen der Grundwasserströmung zu erwarten sind. Es wird davon ausgegangen, dass die Wärmeleistung des in die Bohrlöcher eingebrachten Abfalls die hydraulischen Eigenschaften des Festgesteins nicht verändert.

Je nach eingelagerten Radionukliden, ihrer Menge und der Einlagerungsgeometrie der Behälter ergeben sich Wärmefelder mit unterschiedlichem Temperaturverlauf und verschiedenen Höchsttemperaturen. Ein Ansteigen der Temperatur über einen Grenzwert von  $100^\circ\text{C}$  ist nicht zulässig, da sonst die Gefahr der Bildung eines Mehrphasenflusses, einer Reduktion der mechanischen Festigkeit sowie eine Umwandlung der Minerale des Wirtsgesteins besteht.

#### Modellaufbau

Das in Kapitel 4.3.2.1. beschriebene Modell wird um zwei zusätzliche Wärmequellen erweitert. Diese markieren die durch den radioaktiven Zerfall induzierte, vorübergehend zusätzliche entstehende Wärme. Laut der zur Zeit verfolgten Endlagerauslegung und des erzeugten Profilschnittes liegt die Einlagerungstiefe im Bereich der weitgehend als ungestört angenommenen Gesteinsmatrix. Neben dieser wird zusätzlich in der oberen horizontalen Kluft  $h_{EK1}$  eine Wärmequelle eingefügt, um die maximal zu erwartende Auswirkung auf den Tracertransport zu untersuchen, vgl. Abb. 50.

Die Eingabe des Temperaturverlaufs erfolgt auf der Grundlage von Wärmeausbreitungsrechnungen, die im Rahmen des Projektes „ASTER“ von der DBE Tec durchgeführt worden sind /WAL 05. Die sich demnach durch den radioaktiven Zerfall ausbildende Temperaturerhöhung im Einlagerungsbereich ist in Abb. 49 für das zur Zeit bestehende Einlagerungskonzept in Bohrlöchern dargestellt.

Das Ergebnis der Rechnungen zeigt, dass zwischen 4 bis 6 Jahre nach Einlagerung in einer Tiefe von etwa 650 m u.GOK mit etwa 74°C die höchsten Temperaturen erreicht werden. Danach nimmt die Temperatur kontinuierlich ab.

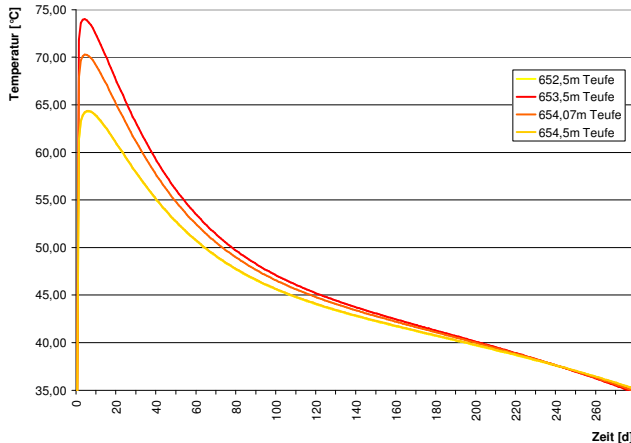


Abb. 49: Temperaturen im Bereich der eingelagerten Abfallbehälter nach Berechnungen der DBE Tec. Die Temperatur des geothermischen Tiefengradienten beträgt in diesem Bereich etwa 19,5°C. Die Kurven für eine Teufe von 652,5m und 654,5m sind nahezu identisch.

Die Freisetzung des Tracers findet innerhalb der horizontalen Kluft hEK1 statt. Die Rechnungen werden mit zwei verschiedenen Kluftdurchlässigkeiten  $7 \cdot 10^{-5}$  m/s und  $6 \cdot 10^{-7}$  m/s durchgeführt.



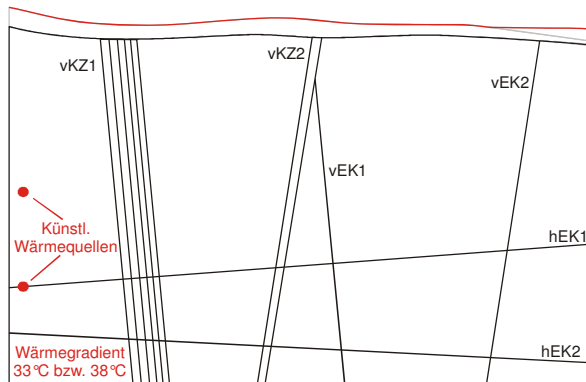


Abb.50: Hydrogeologisches Strukturmodell mit Wärmerandbedingung für die Neubildung des natürlichen geothermischen Wärmegradienten und der beiden zusätzlichen durch radioaktiven Zerfall erzeugten Wärmequellen

### Modellergebnis

Die Rechnungen zeigen, dass die Wärmequelle in der Gesteinsmatrix in einem konzentrischen Umkreis von maximal 50 m eine Erhöhung des Wärmefeldes über etwa 100 Jahre verursacht. Diese übt jedoch keine nennenswerte Auswirkung auf die Grundwasserströmung aus. Wird die Wärme innerhalb der horizontalen Kluft freigesetzt, erfolgt je nach Kluftdurchlässigkeit und daraus resultierender Strömungsgeschwindigkeit unterschiedlich in der Regel ein schneller Abtransport. Die Temperaturerhöhung ist daher nur von kurzer Dauer.

Der Zeitpunkt des ersten Traceraustritts in die Deckschichten verändert sich, verglichen mit derjenigen Rechnung ohne zusätzliche Wärmequelle, nur unwesentlich und liegt bei weniger als 10 Jahren. Die Zone der erhöhten Kluftdichte vKZ2 bleibt unabhängig von unterschiedlicher Kluftdurchlässigkeiten und Wärmevarianten der schnellste Transportpfad. Die zusätzliche Temperaturerhöhung ist somit zu kurzfristig, als dass sie zu einer nennenswerten Veränderung der Grundwasserströmung und des Stofftransports führen könnte.

## 4.4. Radionuklidtransportmodell

Die Modellrechnung erfolgt in zwei Schritten:

- Zunächst wird ein kleinräumiges 50 m \* 100 m Modell erstellt, welches einen porösen Gesteinskörper abbildet und den Transport und Zerfall des Radionuklids U-232 und eines seiner Tochternuklide Th-228 berechnet. Das Ergebnis wird mit derjenigen einer bereits mit dem Programm r<sup>3</sup>t durchgeführten Modellrechnung verglichen um zu prüfen, ob sie zu den gleichen Ergebnissen führt, vgl. Kapitel 4.4.1.
- In einem zweiten Schritt wird das in Kapitel 4.3.1. beschriebene geklüftete zweidimensionale Modellgebiet als Grundlage für eine Radionuklid-Transportrechnung genutzt, in der insgesamt 14 Radionuklide betrachtet werden, um das Programmverhalten bei einer komplexen Transportrechnung zu untersuchen, vgl. Kapitel 4.4.2.

### 4.4.1. Vergleichende Testrechnung

#### Modellaufbau

Der Modellaufbau richtet sich nach einer mit dem Programm  $r^3t$  bereits durchgeführten Rechnung /FEI 08/. Auf die Eingabe von Klüften wird verzichtet und die Summe der betrachteten Radionuklide auf zwei begrenzt. Die Testrechnung umfasst ein zweidimensionales Gebiet von 100 m Länge und 50 m Breite. Das Modellgebiet enthält einen gespannten Aquifer. Die Strömungsgeschwindigkeit beträgt von links nach rechts 1 m/a. Über den oberen und unteren Modellrand findet kein Zu- oder Abstrom statt. In der Mitte des linken Randes befindet sich eine U-232 Quelle, die 10 Jahre lang eine gleichbleibende Konzentration von  $6,35 \cdot 10^8$  g/l freigesetzt. Die Porosität des Gesteins und die Sorption der beiden Radionuklide unterscheiden sich innerhalb des Modellgebietes. In der linken Modellhälfte beträgt die Porosität 0,2 [-] und der Kd-Wert  $2 \cdot 10^{-3}$  m<sup>3</sup>/kg für U-232 und  $2 \cdot 10^{-1}$  m<sup>3</sup>/kg für Th-228. In der rechten Modellhälfte beträgt die Porosität 0,1 [-], der Kd-Wert dagegen  $8 \cdot 10^{-2}$  m<sup>3</sup>/kg für U-232 und  $1 \cdot 10^{-3}$  m<sup>3</sup>/kg für Th-228. Der Modellaufbau ist in Abb. 52 schematisch dargestellt.

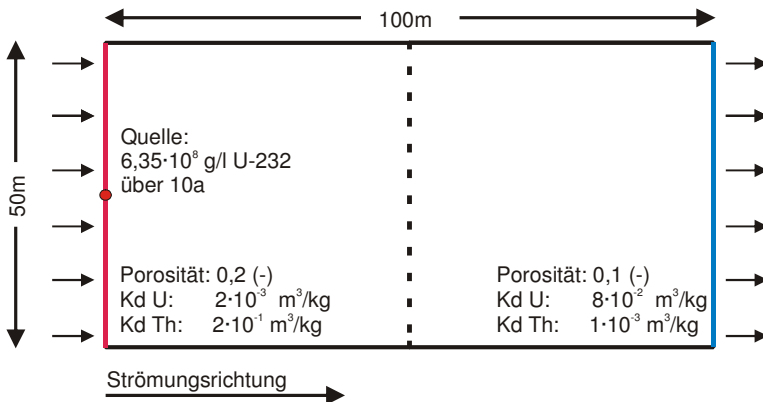


Abb. 51: Schematische Darstellung des Modellaufbaus für die vergleichende Testrechnung.  
 schwarz: undurchlässiger Modellrand  
 rot: Grundwassereinstrom  
 blau: Grundwasserausstrom

Modelliert wird der Transport und Zerfall des Radionuklids U-232 sowie die Entstehung, der Transport und der Zerfall des Tochternuklids Th-228. Das Tochternuklid wird dabei ausschließlich durch den Zerfall des Ausgangsnuklids gebildet. Die Halbwertszeit wird für U-232 mit 72 Jahren angenommen, diejenige für Th-228 mit 2 Jahren.

Die Diffusionskonstante beträgt für beide Radionuklide  $1 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ , die longitudinale Dispersion 1 m und die transversale Dispersion 0,1 m. Die Eingabewerte für das Modell  $r^3t$  und die entsprechenden Werte für das Modell FEFLOW sind in Tab. 10 aufgeführt.

Tab. 10: Eingangsdaten der vergleichenden Testrechnung für die Programme  $r^3t$  und FEFLOW

		$r^3t$		Feflow	
Darcy		1	[m/a]	0,00274	[m/d]
Porosität	links	0,2	[-]	0,2	[-]
	rechts	0,1	[-]	0,1	[-]
U 232-Quelle	Zeitraum	10	[Jahre]	10	[Jahre]
	Menge	$1 \cdot 10^9$	[mol/m <sup>3</sup> *a]	$6 \cdot 10^8$	[g/d]
Sorption U-232	links	0,002	Kd [m <sup>3</sup> /kg]	5	[-]
	rechts	0,08	Kd [m <sup>3</sup> /kg]	200	[-]
Sorption Th-228	links	0,2	Kd [m <sup>3</sup> /kg]	500	[-]
	rechts	0,001	Kd [m <sup>3</sup> /kg]	2,5	[-]
Gesteinsdichte		2500	[kg/m <sup>3</sup> ]	-	-
Zerfall	U232	72	[Jahre T <sup>1/2</sup> ]	$3 \cdot 10^{-6}$	[10 <sup>-4</sup> s]
	Th228	2	[Jahre T <sup>1/2</sup> ]	$1,10 \cdot 10^{-4}$	[10 <sup>-4</sup> s]
Diffusion	U und Th	$1 \cdot 10^{-9}$	[m/s <sup>2</sup> ]	$1 \cdot 10^{-9}$	[m <sup>2</sup> /s]
Disp long	U und Th	1	[m]	1	[m]
Disp trans	U und Th	0,1	[m]	0,1	[m]

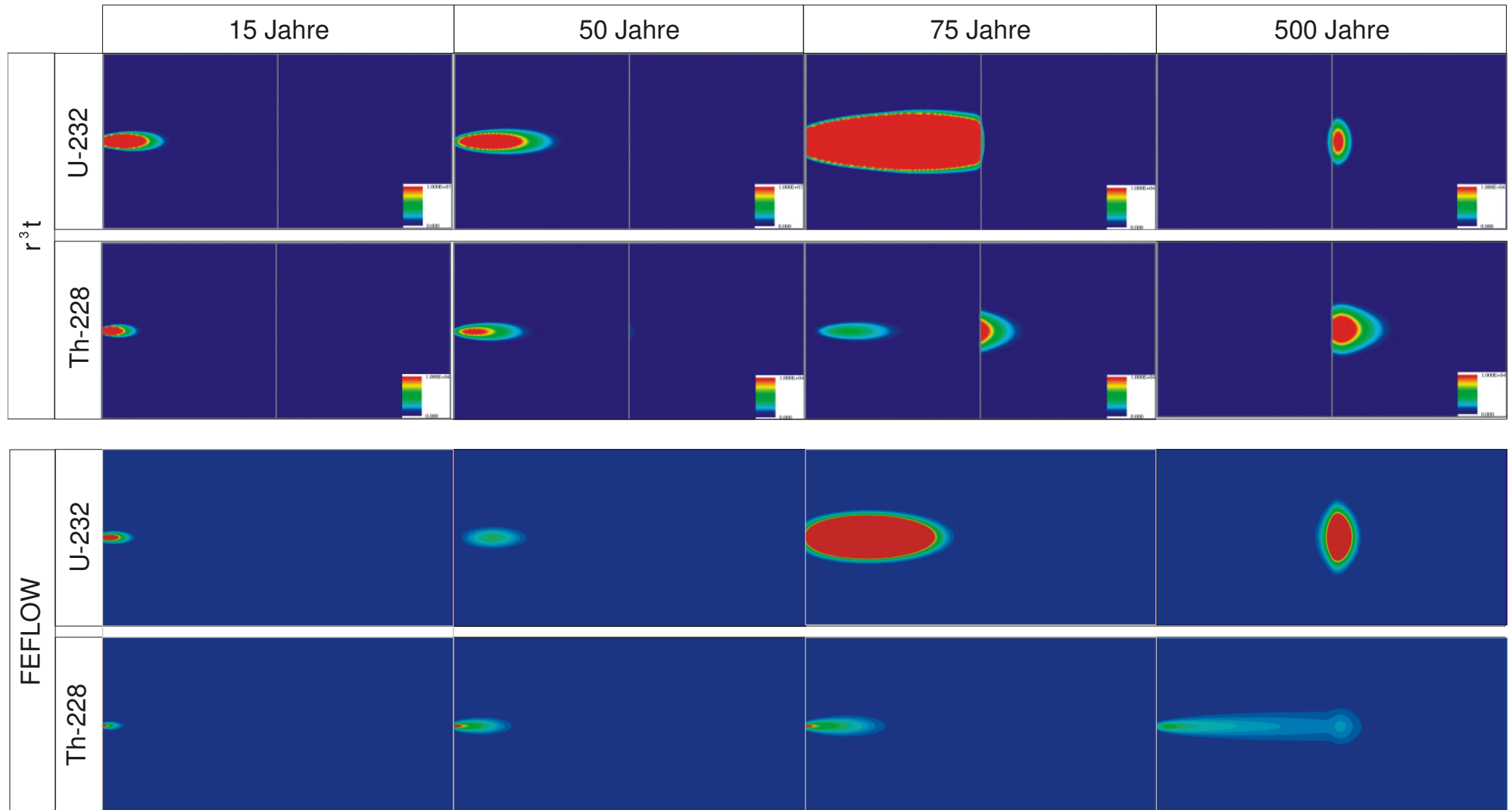
## Modellergebnis

Die Rechenergebnisse beider Programme sind in Abb. 52 für vier verschiedene Zeitpunkte nach 15, 50, 75 und 500 Jahren dargestellt. Die Legende der FEFLOW-Ergebnisse ist mit denjenigen der entsprechenden  $r^3t$ -Ergebnisse identisch und nicht separat aufgetragen. Es wird deutlich, dass die in den beiden Modellhälften stattfindende unterschiedliche Rückhaltung der Radionuklide und ihre sich stark voneinander unterscheidende Zerfallsrate deutlich Einfluss auf ihre Ausbreitungsfähigkeit nehmen. So wird das Uran innerhalb der linken Modellseite aufgrund der geringen Sorption relativ schnell transportiert. Auf der rechten Seite erfolgt dagegen eine höhere Sorption, so dass der Transport verzögert abläuft. Beim Thorium ist es genau umgekehrt: In der linken Modellhälfte findet aufgrund der hohen Sorption ein stark verlangsamter Transport statt, während dieser in der rechten Modellhälfte aufgrund der dortigen geringeren Sorption schneller abläuft. Insgesamt liegen die Konzentrationen des Thoriums aufgrund seiner höheren Zerfallsrate sowie der Tatsache, dass es sich erst aus dem Uran bildet deutlich niedriger als die des Urans.

Das beschriebene Transportverhalten der beiden Radionuklide verläuft in beiden Modellrechnungen qualitativ in ähnlicher Weise. Im Hinblick auf ihre Konzentration weisen die Ergebnisse jedoch zum Teil erhebliche Unterschiede auf. Besonders für den Thorium-Transport werden diese ab 75 Jahren Transportzeit deutlich. Die höchsten Thorium-Konzentrationen in den Ergebnissen der FEFLOW-Rechnung sind anders als in der  $r^3t$ -Rechnung weiterhin am linken Modellrand zu finden. Zudem erscheint die Thorium-Konzentration erst stark verzögert und mit erheblich geringerer Konzentration auf der rechten Modellhälfte.

Warum sich die beiden Rechnungen in diesen Punkten unterscheiden konnte bisher nicht abschließend geklärt werden. Es liegt jedoch die Vermutung nahe, dass die Lösung der Transportgleichung die unterschiedlichen Modellergebnisse verursacht. Dafür spricht auch, dass der im FEFLOW-Modell durchgeführte Wechsel von der konvektiven Form der Transportgleichung zu der divergenten schon zu einer Angleichung der Schadstofffähigkeiten führte. Ein detaillierter Vergleich der mathematischen Umsetzung der Transportprozesse zwischen den beiden Programmcodes würde die Unterschiede in den Modellergebnissen wahrscheinlich erklären können.



Abb. 52: Modellergebnisse der zwischen den Programmen  $r^3t$  und FEFLOW durchgeführten vergleichenden Testrechnung





### 4.4.2. Rechnung im lokalen Maßstab

Trotzdem die in Kapitel 4.3.1. beschriebene Vergleichsrechnung nicht das erwartete Ergebnis brachte, wird an dieser Stelle eine Radionuklidtransportrechnung im lokalen Maßstab durchgeführt. Diese soll Auskunft über die technische Machbarkeit einer solchen komplexen Rechnung geben. Die Rechnung basiert auf dem in Kapitel 4.3.1. beschriebenen zweidimensionalen Grundwasserströmungsmodell der Version 3 unter Erweiterung des Radionuklidtransports sowie einer Zerfallsreihe.

#### Modellaufbau

Um den Transport der Radionuklide berechnen zu können, ist die Eingabe ihrer Quellterme sowie ihrer Zerfalls- und Aufbaucharakteristik in Form ihrer Zerfallsreihen erforderlich. Die aus dem Nahfeldbereich des Endlagers austretenden zeitabhängigen Radionuklidkonzentrationen wurden zuvor mit Hilfe des Programms GRAPOS aus dem Programmsystem EMOS /BUH 96/, /BUH 99/ im Rahmen des Projektes „ASTER“ berechnet /ZIE 04/. Um eine Übertragung dieser Ergebnisse in das Programm FEFLOW zu ermöglichen, wurde zunächst eine Schnittstelle in Form eines Dateikonverters erstellt. Seine Eingabemaske ist in Abb. 54 dargestellt.

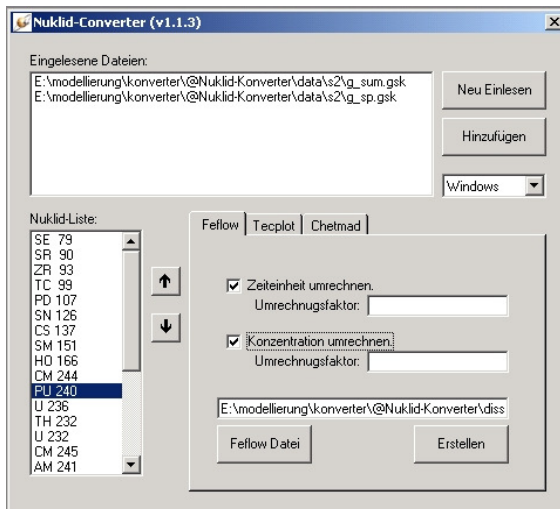


Abb. 54: Eingabemaske des Dateikonverters nach S. Jahns

Für die Rechnungen werden die Quellterme sowie der Zerfall der Radionuklide Sr-90, Cs-135, Cs-137, Sm-151, Pu-240 und Am-241 eingelesen, für Pu -240 und Am-241 zusätzlich Aufbau und Zerfall einiger ihrer Tochternuklide berücksichtigt, vgl. Tab. 11. Die Halbwertszeit liegt zwischen 10 Tagen für Ac-225 und mehr als 1 Mio. Jahre für Th-232, vgl. Tab. 11.

Tab. 11: Halbwertszeit der berücksichtigten Radionuklide

Element	Halbwertszeit [Jahre]
Sr-90	$2.86 \cdot 10^1$
Cs-135	$2 \cdot 10^6$
Cs-137	$3.02 \cdot 10^1$
Sm-151	$9.3 \cdot 10^1$
Pu-240	$6.56 \cdot 10^3$
U-236	$2.34 \cdot 10^7$
Th-232	$1.41 \cdot 10^{10}$
Am-241	$4.32 \cdot 10^2$
Np-237	$2.14 \cdot 10^6$
U-233	$1.59 \cdot 10^5$
Pa-233	$7.39 \cdot 10^{-2}$
Th-229	$7.88 \cdot 10^3$
Ac-225	$2.74 \cdot 10^{-2}$
Ra-225	$4.05 \cdot 10^{-2}$

### Modellergebnis

Die Rechnung zeigt eindrucksvoll die Komplexität der Aufgabenstellung. Zu Beginn der Arbeiten wurde eine sehr lange Rechenzeit benötigt. Mit Ablauf der ersten Woche waren nur 500 Jahre modelliert worden. Es wird vermutet, dass die sich stark unterscheidenden Halbwertszeiten das Zeitschrittschema sehr klein hielten, so dass der Rechenfortschritt nur gering war. Die Verwendung des SAMG-Lösers unter Verwendung der Programm-Version 5.3 beschleunigte die Rechnung, so dass eine Million Jahre Modellzeit in weniger als zwei Stunden abgeschlossen waren. Damit ist aus rein technischer Sicht eine Anwendbarkeit des Programms für diese Art Aufgabenstellung gegeben.

Desweiteren stellt die Datenübertragung des mit dem Programm GRAPOS berechneten Radionuklidaustrags in das Programm FEFLOW mit Hilfe des erzeugten Dateikonverters kein Problem mehr dar.

## 5. Zusammenfassende Darstellung und Diskussion der Ergebnisse

Der Forschungsschwerpunkt lag in der Modellierung der Grundwasserströmung und des Tracer- bzw. Radionuklidtransports innerhalb eines exemplarischen granitoiden Gesteins im Gebiet „Itatskij“.

Im Rahmen der Modellarbeiten wurden **drei Themenbereiche** bearbeitet und diskutiert:

Der erste ist von modelltechnischer Relevanz und umfasst die Erprobung und Diskussion der in der Programmversion 5.2 neu hinzugekommenen Module der „Eingabe diskreter Elemente“ und des „Mehrkomponenten-Transports“ zum Zweck der Einarbeitung von zwei- und dreidimensionalen Kluftstrukturen im lokalen und regionalen Maßstab sowie für die Berücksichtigung radioaktiver Zerfallsreihen. Er wird in Kapitel 5.1 behandelt.

Der zweite bearbeitet Detailfragen zur Grundwasserhydraulik in einem geklüfteten Grundwasserleiter. Darin geht es um die Relevanz der einzelnen Gesteinsparameter sowie den möglichen Einfluss unterschiedlich ausgeprägter Wärmefelder auf die Grundwasserströmung und den Tracer- bzw. Radionuklidtransport. Die Ergebnisse werden zusammenfassend in Kapitel 5.2 wiedergegeben.

Der dritte stellt die Verbindung zum Hintergrund der Arbeit her, indem er sich mit der Frage befasst, ob das Programm FEFLOW für das eindimensionale Programm CHETMAD wichtige zusätzliche Informationen liefern und somit zu einer Verbesserung der eindimensionalen Modellannahmen führen kann und ob Vereinfachungen für die praktische Erkundung abgeleitet werden können. Eine Diskussion dieser Thematik wird in Kapitel 5.3 geführt.

## 5.1. Erprobung der neuen Programmmodule

Die Aufnahme von diskreten Kluftsystemen in ein Grundwasserströmungsmodell war mit zunehmender Komplexität der Gesteinsstrukturen nicht immer einfach zu lösen.

Zum einen stellte sich die Frage welche der im Gestein vorhandenen Klüfte die hydraulisch relevanten sind und damit eine gezielte Aufnahme rechtfertigten. Diese wurde im Rahmen der durchgeführten Modellarbeiten nur am Rande diskutiert, da eine Antwort mit der zur Zeit herrschenden Datenlage nicht möglich war.

Zum anderen galt es die verschiedenen Kluftstrukturen sinnvoll zu vereinfachen, um sie in den Modellen abbilden zu können. Vor allem die Darstellung von Zonen hoher Kluftdichte, wie sie zum Beispiel im Bereich von Störungszonen auftreten, war Gegenstand vieler Diskussionen. Eine zusätzlicher stochastische Eingabe eines Kluftnetzwerkes ist in dem Programm FEFLOW nicht vorgesehen. Für die Zonen erhöhter Kluftdichte könnte als Alternative das Gitternetz so fein diskretisiert werden, dass die Eingabe vieler kleinskaliger Klüfte in Form diskreter Elemente ermöglicht wird. Es wurde jedoch davon abgesehen, da vielfach keine genaue Kenntnis über die vorhandene Kluftdichte vorlag und zum anderen davon ausgegangen wurde, dass in diesen Bereichen eine große Anzahl mikroskaliger Gesteinsinhomogenitäten ausreicht, ein aus modelltechnischer Sicht quasi-porösen Bereich ähnlicher Durchlässigkeit zu schaffen. Es handelt sich dabei um eine Hilfskonstruktion, die zwar die tatsächlich vorhandenen Klüfte nicht im Detail darstellt, jedoch die Grundwasserströmung in diesem Bereich mit einer hinreichenden Genauigkeit wiedergibt.

Desweiteren gestaltete sich in dreidimensionalen Modellen die Eingabe von Klüften, die von einem senkrechten Einfallswinkel bzw. den in Form von Slices erzeugten Gesteinsschichten abweichen als sehr schwierig. Der Grund dafür lag in der Abhängigkeit der Klufteneingabe an das bestehende Gitternetz, weshalb sich ihr Einfallswinkel in einer in gleicher Weise geeigneten Schichtgrenze wieder finden muss. Bei der Anzahl der aufgenommenen Klüfte, erwies sich ein solches Vorgehen als äußerst problematisch.

Die im Anschluss an die Aufnahme der diskreten Elemente erfolgte Generierung des Gitternetzes stellte mit zunehmender Modellgröße und Anzahl der Kluffstrukturen ein weiteres Problem dar. Hauptgrund dafür waren die räumlich eng begrenzten Zonen erhöhter Kluftdichte (beispielsweise im Bereich von Störungszonen) sowie ungünstige Verschneidungswinkel zweier oder mehrerer Klüfte. Die zur Zeit in FEFLOW zur Verfügung stehenden mathematischen Methoden (TMesh, Triangle, Advancing Front, Transportmapping, Gridbuilder /WAS 09/) konnten das Problem häufig nicht zufrieden stellend lösen. Generiert wurden des Öfteren geometrisch ungünstige Elemente, die bei zu hoher Anzahl numerische Probleme während der späteren Modellrechnungen bereiten.

Abschließend ist zu bemerken, dass mit Hilfe des Moduls Strömungs- und Transportprozesse in einem Festgestein mit einfach gehaltenen Kluftstrukturen berechnet werden können. Dies konnte durch die in den Kapiteln 4.1, 4.2 und 4.3 beschriebenen Modelle gezeigt werden. Allerdings gelangt das Programm bei zunehmender Komplexität der Modellrechnung in Form erhöhter Kluftanzahl und Konnektivität oder einer dreidimensionalen Betrachtung schnell an seine Grenzen.

Der Einsatz des Mehrkomponenten-Transport Moduls für Transportmodellierungen unter Berücksichtigung von Radionuklidzerfallsreihen (vgl. Kapitel 4.4) zeigte, dass das Programm FEFLOW edv-technisch für einen solchen speziellen Fall der Transportrechnung geeignet ist. Jedoch bleibt zu prüfen, aus welchem genauen Grund die Ergebnisse mit denen des Programms r<sup>3</sup>t nicht vollständig übereinstimmen.

## 5.2. Detailfragen der Grundwasserhydraulik

Das gestaffelte Vorgehen, angefangen bei Einzelstudien für die Lösung spezieller Fragestellungen, über dreidimensionale Modellrechnungen im regionalen Maßstab und anschließender lokaler zweidimensionaler Transportrechnungen unter Einbeziehung der erhaltenen Randbedingungen durchzuführen, erwies sich als zielführend. In verschiedenen Skalenbereichen konnten die prinzipiellen Strömungs- und Transportprozesse für verschiedene Ausprägungen der Gesteinsmatrix und des Kluftsystems sowie Wärmefelder dargestellt und diskutiert werden.

Die Modellrechnungen zeigten, dass das Kluftsystem für die Grundwasserhydraulik und den Stofftransport an Bedeutung zunimmt, je größer die Differenz zwischen Matrix- und Kluftdurchlässigkeit ist. In der Regel stellt das Kluftsystem auf Grund seiner im Vergleich zur Gesteinsmatrix häufig deutlich höheren hydraulischen Leitfähigkeit bevorzugte Fließbahnen dar, in denen die Advektion der dominante Transportprozess ist. Die Grundwasserströmungsgeschwindigkeit steht daher in engem Zusammenhang mit der Ausprägung des Kluftsystems.

Bei gleicher Durchlässigkeit entschied die Orientierung der Klüfte wie intensiv sie durchströmt werden. Klüfte, die in Richtung des hydraulischen Gradienten ausgerichtet waren, wurden dabei schneller durchströmt als solche, die senkrecht oder diagonal dazu angeordnet waren. Die Höhe des Wasserdrucks innerhalb des Kluftnetzwerks entschied, inwieweit diese letztgenannten in die Grundwasserströmung einbezogen werden konnten. Kontrollierte das Kluftsystem den Grundwasserfluss eines Gesteins, so kann es das durch den hydraulischen Gradienten vorgegebene Strömungsfeld durch die Bereitstellung schneller, von dem hydraulischen Gradienten abweichender Fließbahnen stark verändern, vgl. Kapitel 4.3. Die sich dadurch ergebende Grundwasserströmung orientierte sich dann nicht mehr ausschließlich an dem vorherrschenden hydraulischen Gradienten sondern auch an der Kluftgeometrie und der Anordnung der Klüfte zueinander.

Die Strömungsgeschwindigkeit war umso höher, je geringer die Anzahl einzelner gut leitender Klüfte mit einer günstigen Neigung zum hydraulischen Gefälle war. War die Kluftdichte erhöht, nahmen die einzelnen diskreten Fließwege an Relevanz ab, so dass der gesamte Bereich nahezu homogen durchströmt wurde. Die Strömungsgeschwindigkeit glich sich dann immer mehr derjenigen eines Porengrundwasserleiters an. In einzelnen von der Tracerquelle entfernt liegenden Klüften konnte der Stofftransport dadurch schneller in die überlagernden Deckschichten gelangen als durch eine näher an der Quelle gelegene Zone erhöhter Kluftdichte.

Das Kluftsystem hatte nicht nur Auswirkungen auf das Strömungsgeschehen im kristallinen Festgestein, sondern konnte auch Einfluss auf das darüber liegende Deckgebirge nehmen. Die Ergebnisse der Modellrechnungen aus Kapitel 4.3 weisen darauf hin, dass das aufsteigende Grundwasser im Bereich des Deckgebirges zu einem veränderten Grundwasserfluss führen kann.

Es zeigte sich weiterhin, dass die transversale Stoffausbreitung infolge Diffusion durch die Kanalisierung der Fließbewegung innerhalb des Kluftsystems stark verringert wird, vgl. Kapitel 4.3. Der Transport in die umgebende Gesteinszone der Klüfte erfolgt daher in der Regel äußerst langsam. Nur innerhalb stark alterierten Gesteinszonen konnte der Transport in diese schneller erfolgen. Die Matrixdiffusion stand dabei in unmittelbarem Zusammenhang mit dem zwischen den Klüften und der Gesteinsmatrix herrschenden Konzentrationsgradienten und war mit der dort vorhandenen Transportgeschwindigkeit korreliert. Große Öffnungsweiten, geringe Durchlässigkeit und hohe Kluftdichte sowie blind endende Klüfte setzen die Strömungsgeschwindigkeit herab und förderten somit die Diffusion in das Nebengestein. In den Modellrechnungen aus Kapitel 4.3 wurde die verstärkt stattfindende Diffusion in die Festgesteinsmatrix vor allem in den quer zur Grundwasserströmung angeordneten oder blind auslaufenden Klüften sowie in Bereichen hoher Kluftdichte deutlich. Die in der Gesteinsmatrix zurückgebliebenen Stoffkonzentrationen standen für den advektiven Transport innerhalb des Kluftsystems zunächst nicht mehr zur Verfügung. Die Rediffusion in die Kluft erfolgte nur sehr langsam.

Hinzugefügte Wärmefelder veränderten die Strömungs- und Transportpfade sowie Austrittsorte in das Deckgebirge nicht nennenswert.

Die Modelle zeigen somit, dass neben der Differenz der Durchlässigkeitsbeiwerte zwischen Kluft und Matrix, die Öffnungsweite zusammen mit der Orientierung sowie der Anzahl der Klüfte und deren Vernetzung in unterschiedlichen Skalenbereichen die entscheidenden Parameter für die Grundwasserströmungsgeschwindigkeit und –richtung darstellen. Zu beachten ist, dass Klüfte je nach Randbedingungen sowohl als aufwärts als auch als abwärts gerichtete Fließwege genutzt werden können. Die große Abhängigkeit der Grundwasserströmung und des Stofftransportes von den schlecht zu erkundenden Kluftstrukturen erschweren zudem die Vorhersagbarkeit des Austrittsortes eines Stoffes und seine dort zu erwartende Konzentration erheblich.

### **5.3. Mögliche Unterstützung sicherheitsanalytischer Rechnungen**

Die mit dem Programm CHETMAD durchgeführten sicherheitsanalytischen Rechnungen bilden den Transportpfad eindimensional ab, wobei die Durchführung probabilistischer Monte-Carlo-Simulationen unter Variation von nahezu allen Eingabeparametern möglich ist. Aufgrund der Eindimensionalität der Rechnungen besteht die Notwendigkeit, das hydraulische System stark zu abstrahieren. Wie die Modellrechnungen gezeigt haben, erfordert dieser Prozess eine genaue Kenntnis des großräumigen Grundwasserregimes sowie der hydraulisch relevanten Kluftsysteme (Geometrie, Anzahl der Klüfte, Konnektivität, Durchlässigkeitsbeiwert, Transportweglänge). Daher kann im Vorfeld sicherheitsanalytischer Rechnungen die Durchführung mehrdimensionaler hydrogeologischer Modellrechnungen mit dem Programm FEFLOW durch die Untersuchung der großräumigen Strömungsverhältnisse eine Einschätzung der Relevanz verschiedener Kluftstrukturen und damit eine nachvollziehbare Darstellung des am Ende stark vereinfachten Kluftsystems liefern.

Da in FEFLOW die Eingabe der Gebietsdaten (digitales Geländemodell, Pegelwerte und Grundwasserneubildung, zweidimensional auch geologische Informationen über Kluftgeometrie) problemlos über eine GIS-Schnittstelle erfolgt, ist sind die in das Modell einfließenden Felddaten nachvollziehbar. Es zeigte sich, dass die direkte Verwendung dieser Daten und die Möglichkeit ihrer mehrdimensionalen Darstellung die Verständlichkeit und Akzeptanz der Modellrechnungen,



vor allem bei denjenigen, die diese Daten im Gelände ermitteln und in einem GIS pflegen, stark erhöhen.

Aufgrund der prinzipiell eingeschränkten praktischen Erkundungsmöglichkeiten in Festgesteinen und der Unsicherheit der Entwicklung eines Endlagers über lange Zeiträume, wie sie von der LZSA betrachtet werden, ist für eine belastbare Aussage der Sicherheit eines tiefen Endlagers die Variation von Parametern, welche die Grundwasserströmung und den Stofftransport beeinflussen, notwendig. Die mit dem Programm FEFLOW durchführbaren Rechnungen sind wegen des Rechenaufwands und der vorliegenden Programmversion nur deterministisch möglich, d.h. sie geben jeweils genau eine mögliche Realisation der Gesteinsparameter wieder, die sowohl zeit- als auch ortsabhängig sind. Eine stochastische Parametervariation kann das Programm nicht leisten. Eine probabilistische Sicherheitsanalyse mit der Berechnung der sich aus den verschiedenen Parameter-Varianten ergebenden potenziellen Strahlenexpositionen bleibt daher dem Programm CHETMAD vorbehalten.

Für die praktische Erkundung kann aus den Modellergebnissen abgeleitet werden, dass

- in den Untersuchungsgebieten nur die hydraulisch wirksamen Kluftstrukturen untersucht werden müssen, da sie den Haupttransportpfad für gegebenenfalls aus dem Nahbereich des Endlagers austretende Radionuklide darstellen,
- jedes Untersuchungsgebiet detailliert auf seine hydraulisch wirksamen Kluftsysteme hin untersucht werden muss, welche dann im Anschluss möglichst genau (Geometrie, Öffnungsweite und Durchlässigkeit) im Modell wiederzugeben sind,
- eine Übertragung von Modellergebnissen zwischen verschiedenen Untersuchungsgebieten nur sehr eingeschränkt möglich ist, da ihre Kluftsysteme in der Regel nicht vergleichbar sind. Selbst Modellergebnisse kleinräumiger Studien lassen sich aufgrund der Überlagerung von Einzeleffekten bei der Erhöhung der Kluftdichte teilweise auf großräumigere Modelle übertragen, vgl. Abb. 54.

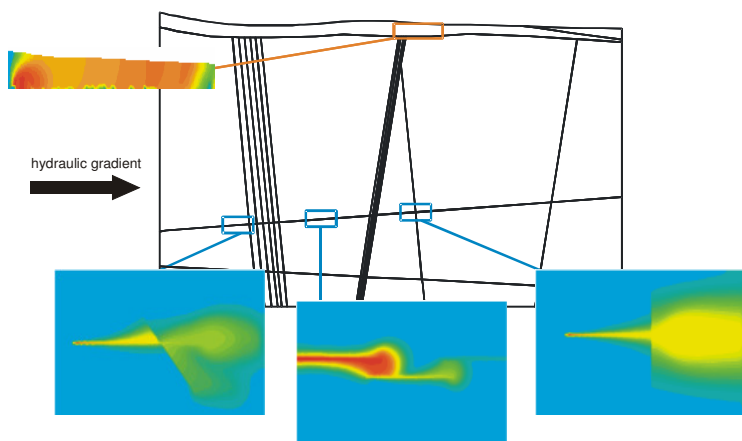


Abb. 54: Kleinräumige Stoffausbreitungsrechnung für verschiedene Kluftanordnungen und die poröse Deckschicht.

## 6. Verzeichnisse

### Literaturverzeichnis

- /AVV 90/ Allgemeine Verwaltungsvorschrift (AVV) zu §45 Strahlenschutzverordnung: Ermittlung der Strahlenexposition durch die Ableitung radioaktiver Stoffe aus kerntechnischen Anlagen oder Einrichtungen vom 21. Februar 1990, erschienen im Bundesanzeiger, 42. Jg., Nummer 64a, 1990.
- /AND 93/ Anderson, E. B.; Dazenko, V. M.; Kedrovskij, O. L. et al.: Geologische Untersuchungen auf dem Territorium des Südtails des Jenniseijsker Höhenrückens als Begründung für die Möglichkeit einer sicheren Endlagerung verfestigter hochaktiver Abfälle des Werkes RT-2 in tiefen geologischen Formationen (russ.), Chlopin-Institut, St. Petersburg, 1993.
- /AND 96/ Anderson, E. B.; Velitschkin, V. I.; Dazenko, V. M. et al.: Geologisch-geophysikalische Untersuchung des Nordteils des Nishnekansker Massives mit dem Ziel der Suche von monolithischen Granitoidblöcken mit Perspektiven für die Endlagerung verfestigter hochaktiver Abfälle des Werkes RT-2 (russ.), Chlopin-Institut, St. Petersburg, 1996.
- /AND 98/ Anderson, E. B., Shabalev, S. I., Savonenkov, V. G., et al.: Investigations of Nizhnekanskiy granitoid massif (Middle Siberia, Russia) as a promising site for deep geological disposal of HLW. Proc. Of Internat. Conf. On Rad. Waste Disp., DisTec 98, Hamburg, 1998.
- /AND 01/ Anderson, E. B.; Lyubtseva, E. F.; Savonenkov, V. G.; Shabalev, S. I.; Rogozin, Y.M.: The proposed geologic repository site at the Nizhnekanskiy granitoid massif near Krasnojarsk, Russia. 9th Internat. High-level Radioactive Waste Management Conference, Las Vegas, 2001.
- /APP 01/ Appelt, D.; Habler W.: AkEnd: Quantifizierung der Wasserdurchlässigkeit von Gesteinen als Voraussetzung für die Entwicklung von Kriterien zur Grundwasserbewegung-Phase 1: Überprüfung der Datenbasis für die Ableitung von Kriterien zur Wasserdurchlässigkeit, 2001.

- /ARK 86/ Arkhipov, S.A.: Isayeva, L.L. et al: Glaciation of Siberia and North-East USSR, Quaternary Science Reviews 5, S. 463-474, 1986.
- /ESR 04/ aktuell ESRI 3/2004 und 4/2004
- /BAL 98/ Baltes, B.: Entwicklung und Anwendung analytischer Methoden zur Eignungsuntersuchung der Verbringung bergbaufremder Rückstände in dauerhaft offene Grubenräume im Festgestein, Abschlussbericht, GRS-140, 1998.
- /BAN 00/ Bankwitz P.; Bahat, D.; Beer S.; Bankwitz, E.: Granitklüftung – Kenntnisstand 80 Jahre nach Hans Cloos, Z. geol. Wiss., 28 (1), S. 87-110, Berlin, 2000.
- /BEA 87/ Bear, J.; Verruijt, A.: Modelling Groundwater Flow and Pollution, relder Publishing Company, 1987.
- /BEA 93/ Bear, J.; Tsang, C.-F.; de Marsily, G.: Flow and Contaminant Transport in Fractured Rock, Academic Press, San Diego, 1993.
- /BEA 99/ Bear, J.; Cheng, A.H.-D., et al.: Seawater Intrusion in Coastal Aquifers-Concepts, Methods and Practises, Kluwer Academic Publishers, Volume 14, 1999.
- /BLU 91/ Blume, H.: Das Relief der Erde - Ein Bildatlas, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart, 1991.
- /BOE 87/ Böckh, E.; Grisseman, C.; Siebenhüner, M.; Kolodziey, A.: Beitrag zu den Methoden der Grundwasserprospektion im kristallinen Grundgebirge Westafrikas-Bericht über das Ergebnis von hydrogeologischen und geophysikalischen Untersuchungen in Burkina Faso, BGR, Archiv-Nr. 105896, 1987.
- /BUH 96/ Buhmann, D. et al.: Das Programmpaket EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle, Version 5, GRS-122, ISBN 3-923875-75-4, 1996.
- /BUH 99/ Buhmann, D.: Das Programmpaket EMOS, Ein Instrumentarium zur Analyse der Langzeitsicherheit von Endlagern, 1999.

- /BOS 91/ Bossart, P.; Mazurek, M.: Grimsel Test Site: Structural Geology and Water Flow-Path in the Migration Shear Zone, Technical Report 91-12, November 1991.
- /CGE 96/ CGER (U.S. National Committee on Fracture Characterization and Fluid Flow for Commission of Geosciences, Environment and resources): Rock Mechanics and Rock Fractures and Fluid Flow: Contemporary Understanding and Applications.- National Academy Press, Washington, D.C., 1996.
- /CHA 95/ Chain, V. E.; Koronovskij, N.: Nordasien, Geologie der Erde 3, Enke Verlag, Stuttgart, 1995.
- /DAV 97/ David, J.: Grundwasserhydraulik: Strömungs- und Transportvorgänge, Friedr. Vieweg & Sohn Verlagsgesellschaft mbH, Darmstadt 1997.
- /DEM 86/ De Marsily, G.: Quantitative hydrogeology for engineers, Academic Press, San Diego, 1986.
- /DIE 02/ Diersch, H.-J. G.: Reference Manual, Wasy Software FEFLOW Wasy Institut for Water Resources Planning and Systems Research Ltd., Berlin 2002.
- /DIE 04/ Diersch, H.-J. G.: User's Manual FEFLOW 5.1, Finite Element Subsurface Flow and Transport Simulation System, Berlin 2004.
- /DIE 06/ Diersch, H.-J. G.: User's Manual FEFLOW 5.3, Wasy Software FEFLOW Wasy Institut for Water Resources Planning and Systems Research Ltd., Berlin 2006.
- /DOL 94/ Dolginow, J.; Kropatschjow, S.; Klitzsch, E.: Abriss der Geologie Russlands und angrenzender Staaten, Schweizerbart'sche Verlagsbuchhandlung, Stuttgart, 1994.
- /EIS 91/ Eisbacher, G. H.: Einführung in die Tektonik, Enke-Verlag, Stuttgart 1991.
- /EXK 04/ [http://www.unet.univie.ac.at/~a9403293/dipl\\_hm/exkurs/exkurs\\_hm.htm](http://www.unet.univie.ac.at/~a9403293/dipl_hm/exkurs/exkurs_hm.htm), date of access: 2004.
- /FEI 04/ Fein, E.: Software Package  $r^3t$  -Model for Transport and Retention in Porous Media, GRS-192, ISBN3-931995-60-7, 2004.
- /FEI 08/ Fein, E.:  $r^3t$  User's Manual, unveröffentlicht, 2008.

- /GAL 79/ Gale, J. E.; Witherspoon, P.A.: Swedish-American Cooperative Program on Radioactive Waste Storage in Mined Caverns in Crystalline Rock; Technical Information Report No.15: An Approach to the Fracture Hydrology at Stripa: Preliminary Results, May 1979.
- /GUE 02/ Günther, A., Carstensen, A., Pohl, W.: The RSS-GIS (Rock Slope Stability GIS): Tools for automated regional sliding susceptibility assessments of hard rock hill slopes. - Proc. MITCH3-Workshop, Potsdam, 1-6, 2002.
- /GUP 03/ Gupalo, T. A.: Bewertung der thermomechanischen Einwirkungen auf die Gesteine in den Untertageanlagen des Bergbau-Chemischen Kombinats (russ.), wiss. Bericht VNIPI Promtechnologie, 2003.
- /HIM 99/ Himmelsbach, T.; König, C.: Hydrogeologische Untersuchungsmethoden von Kluftgrundwasserleitern; 2. Workshop Kluft-Aquifere, Ruhr-Universität Bochum, Shaker Verlag, Aachen 1999.
- /HOE 96/ Hölting, B.: Hydrogeologie- Einführung in die Allgemeine und Angewandte Hydrogeologie 5. Auflage, Enke-Verlag Stuttgart, 1996.
- /HOM 98/ Homer, L.; Moore P.: Vanishing Volcanoes, A guide to the landforms and rock formations of Coromandel Peninsula, Institute of Geological & Nuclear Sciences, ISBN 0-908800-01-0, 1998.
- /HUB 04/ Hubberten, H.W.; Andreev, A.; Astakhov, V.I. et al.: The periglacial climate and environment in northern Eurasia during the last Glaciation; Quaternary Science Reviews 23, 1333-1357, 2004.
- /HYD 08/ <http://www.wissenschaft-technik-ethik.de/>, date of access: 2008.
- /JAG 02/ Jagelke, J.: Grundwassermodell für einen Grundwasserleiter an der Mittelmeerküste: Modellauswahl, Modellaufstellung, Kalibrierung und Aufzeigen von Anwendungsmöglichkeiten, Diplomarbeit, März 2002.

- /JOB 08/ Jobmann, M. et al.: Untersuchungen zur Wirksamkeit des geologischen und geotechnischen Barrierensystems im Hinblick auf die Standortauswahl in magmatischen Gesteinen (WIBASTA), Abschlussbericht, 2008.
- /KHA 85/ Khain, V. E.: Geology of the UDSSR- Beiträge zur Regionalen Geologie der Erde Band 17, Gebrüder Borntraeger, Stuttgart 1985.
- /KHA 94/ Khain, V. E.: Geology of Northern Eurasia-Beiträge zur Regionalen Geologie der Erde, Band 24, Stuttgart 1994.
- /KIN 95/ Kinzelbach, W.; Rausch, R., Grundwassermodellierung-Eine Einführung mit Übungen, Gebrüder Borntraeger Stuttgart, 1995.
- /KOL 97/ Kolditz, O.: Strömung-, Stoff- und Wärmetransport im Kluftgestein, Gebr. Borntraeger, 1997.
- /KRO 95/ Kronberg, P.: Tektonische Strukturen in Luftbildern und Satellitenaufnahmen. Ein Bildatlas, Enke Verlag, Stuttgart, 1995.
- /LEG 96/ Lege, T.; Kolditz, O.; Zielke, W.: Strömungs und Transportmodellierung, Handbuch zur Erkundung des Untergrundes von Deponien und Altlasten, Band 2, Springer-Verlag 1996.
- /LOE 05/ Löfmann, J.: Simulation of hydraulic disturbances caused by the decay Heat of the repository in Olkiluoto, Posiva Oy, ISBN 951-652-139-8, Oktober 2005.
- /LUE 96/ Lührmann, L.; Noseck: Das eindimensionale Transportprogramm CHET2 unter Berücksichtigung nichtlinearer, elementspezifischer Gleichgewichtssorption; GRS-125, Braunschweig 1996.
- /MAA 02/ Maaranen, J.; Lehtiksa, J.; Timonen, J.: Äspö Hard Rock Laboratory: Determination of porosity, permeability and diffusivity of rock samples from Äspö HRL using the Helium gas method, Svensk Kärnbränsle-hantering AB, IPR-02-17, 2002.

- /MAL 95/ Malkovsky, V. I. ; Omelyanenko, A. A. Pek, B. I.: Influence of the Interwell Distance on the thermo-convective Transport of Radionuclides by Groundwater from a two-well high level nuclear waste repository; Russian Academy of Science: Proceedings Fifth International Conference on Radioactive Waste Management and Environmental Remediation ICEM, Volume 1: Cross-Cutting Issues and Management of High-Level Waste and Spent Fuel,; S. Slate, F. Feizollahi, J. Creer, The American Society of Mechanical Engineers, New York 1995.
- /MAR 96/ Maresch, W.; Medenbach O.: Gesteine, Steinbachs Naturführer, Mosaik Verlag, München 1996.
- /MOS 99/ Mosbach-Schulz, O.: Methodische Aspekte probabilistischer Modellierung-Beitragsserie: Probabilistische Expositionsabschätzung (Workshop), 1999.
- /MUR 83/ Murawski, H.; Geologisches Wörterbuch, Enke-Verlag, Stuttgart 1983.
- /NAG 91/ NAGRA: Technical Report NTB 91-12, Wettingen, 1991.
- /NAG 94/ NAGRA: Kristallin-I. Safety Assessment Report, Technical Report NTB 93-22, Wettingen, July 1994.
- /NAU 94/ Naujoks, A.: Theoretische Grundlagen und In-situ Untersuchungen zur Durchströmung von geklüftetem Kristallingestein, Hannover 1994.
- /NIE 91/ Niedersächsische Akademie der Geowissenschaften: Grundwasser in Niedersachsen, Heft 7, Hannover 1991.
- /OHL 00/ Ohlenbusch, R.: Numerische Modellrechnungen zur Ausbreitung von Inhaltsstoffen aus Weichgelinjektionssohlen, Dissertation Universität Karlsruhe, Karlsruhe 2000.
- /PRE 95/ Press, F.; Siever, R.: Allgemeine Geologie; Spektrum Verlag, 1995.
- /POI 97/ Pointet, T: Hard Rock Hydrosystems, IAHS Publication No. 241, Beitrag: Lubczynski, M.: Application of numerical flow modelling combined with remote sensing and GIS techniques for the quantification of regional groundwater resources in hard rock terrains, Wallington Oxfordshire IAHS Press 1997.



- /POT 94/ Poteri, A.: Report YJT-94-08, Nuclear Waste Commission of Finnish Power Companies, Helsinki April 1994.
- /RAM 88/ Ramsay, J. G.; Huber, M. I.: The Techniques of Modern Structural Geology, Volume 2: Folds and Fractures, Academic Press, San Diego 1988.
- /REI 91/ Reinsch, D.: Natursteinkunde - Eine Einführung für Bauingenieure, Architekten, Denkmalpfleger, und Steinmetze, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart 1991, Braunschweig 1991.
- /RUS 96/ Russischer Gesamtbericht 1996 und weitere Berichte aus dem Gebiet Krasnojarsk.
- /SCH 58/ Schatski, N. S.; Bogdanow, A. A.: Grundzüge des Tektonischen Baus der Sowjetunion (Heft 1), Akademie-Verlag Berlin, 1958.
- /SCH 03/ Schwartz, F. W., ; Zhang, H.: Fundamentals of Groundwater, Wiley 2003.
- /SCH 04/ Schätzl, P.: Ankündigungen FEFLOW 5.1, Wasy Aktuell, 10. Jahrgang, Ausgabe 1, März 2004.
- /SIL 02/ Silberhorn-Hemminger, A.: Modellierung von Kluftaquifersystemen: Geostatistische Analyse und deterministisch-stochastische Kluftgenerierung, Institut für Wasserbau an der Universität Stuttgart, 2002.
- /STO 96/ Storck, R; Buhmann, D.; Hirsekorn, R.-P.; Kühle, T.; Lührmann, L: Das Programmsystem EMOS zur Analyse der Langzeitsicherheit eines Endlagers für radioaktive Abfälle, Version 5, GRS-122, März 1996.
- /STR 94/ Strayle, G.; Stober, I.; Schloz, W.: Informationen 6/94; Ergiebigkeitsuntersuchungen in Festgesteinsaquiferen, Geologisches Landesamt Baden-Württemberg, Freiburg i. Br. 1994.
- /STU 02/ Stüben, K.; Jahresbericht 2002/2003, Fraunhofer Institut, S. 38/39.
- /SVE 04/ Svendsen, J.I.; Alexanderson, H.; Astakhov, V.I. et al.: Late Quaternary ice sheet history of northern Eurasia, Quaternary Science Reviews 23, S. 1229-1271, 2004.

- /TEC 85/ Technischer Bericht 85-01; Sondierungsbohrung Böttstein Untersuchungsbericht, Juni 1985.
- /VOB 91/ Voborny, O.; Adank, P. et al.: Modelling of Groundwater Flow in the Rock Body surrounding the underground laboratory, Grimsel Test Site, Technical report 91-03, Oktober 1991.
- /VOL 88/ Volkmer, M.: Kernenergie Basiswissen vom Informationskreis Kernenergie, Hamburg 1988.
- /VOL 03/ Volkmer, M: Basiswissen vom Informationskreis KernEnergie, UBI A Druck, Köln, April 2003.
- /VOL 61/ Volobuev, M. I.; Sykov, S. I.: Zur Frage des absoluten Alters der Gesteine und Minerale des Jenniseijsker Höhenzuges (russ.): Materialien zu den Rohstoffen des Krasnojarsker Gebietes (russ.), Krasnojarsk, 1961.
- /WAL 05/ Wallner, M. et al.: Anforderungen an die Standorterkundung für HAW-Endlager im Hartgestein (ASTER), Abschlussbericht, 2005.
- /WAS 02/ Wasy Institute for Water Resources Planning and Systems Reasearch Ltd., White Papers Vol. I, Berlin 2002.
- /WAS 04/ Wasy Institute for Water Resources Planning and Systems Reasearch Ltd., White Papers Vol. IV, Berlin 2004.
- /WAS 05/ Wasy Institute for Water Resources Planning and Systems Reasearch Ltd., White Papers Vol. III, Berlin 2005.
- /WAS 06/ Wasy Institute for Water Resources Planning and Systems Reasearch Ltd., White Papers Vol. V, Berlin 2006.
- /WEI 99/ Wein, N., Sibirien-Perthes Regionalprofile, Klett-Perthes Verlag, ISBN 3-623-00693-9, 1. Auflage, Gotha 1999.
- /ZIE 04/ Ziegenhagen, J; Hammer, J; Fahrenholz, C. et al.: Anforderungen an die Standorterkundung für HAW-Endlager im Hartgestein (ASTER), 2004.
- /ZIM 07/ Zimmermann, G.; Skalenvarianz hydraulischer und struktureller Eigenschaften geklüfteter Gesteine, Habilitationsschrift an der Fakultät VI der Technischen Universität Berlin, Berlin 2007.

- /VEL 86/ Velichko, A. A.: Faustova, M. A.: Glaciation in the East European Region of the USSR, Quaternary Science Review, Band 5, S. 447-462, 1986.
- /VEL 05/. Velichko, A. A.; Nechaev, V. P.: Cenozoic Climatic and Environmental Changes in Russia, Special Paper 382, ISBN 0-8137-2382-5 The Geological Society of America, 2005.
- /VEL 01/ Velitschkin, V. I. et al.: Untersuchung der mineralogisch-geochemischen und physikomechanischen Eigenschaften der Granitoide des Nishnekansker Massivs (russ.), Bericht IGEM, Moskau 2001.
- /WWW 05/ [www.klimadiagramme.de/Asien/krasnojarsk.html](http://www.klimadiagramme.de/Asien/krasnojarsk.html), date of access: 2005.
- /WWW 07/ <http://www.nea.fr/download/manchester/>, vorgestellt auf dem Geosphere Stability Workshop 2007, date of access: 2008.
- /WWW 08/ [http://www.wissenschaft-technik-ethik.de/wasser\\_eigenschaften.html](http://www.wissenschaft-technik-ethik.de/wasser_eigenschaften.html), date of access: 2008.
- /ZON 90/ Zonenshain, L. P.; Kuzmin M. I.; Natapov, L. M.: Geology of the USSR: A Plate-Tectonic Synthesis, Geodynamics Series Volume 21, American Geophysical Union Washington D. C., 1990.

## Abbildungen

Abb. 1: Typische Erstarrungsformen der Plutonite /REI 91/.....	7
Abb. 2: Petrographische Zusammensetzung granitoider Gesteine /MAR 96/.....	8
Abb. 3: Klassifikation der aus Alkalifeldspat, Plagioklas und Quarz zusammengesetzten magmatischen Gesteine /MAR 96/.....	8
Abb. 4: Beispiele mafischer Ganggesteine /EIS 91/.....	9
Abb. 5: Luftbild eines Granits in Wyoming (USA) /KRO 95/.....	10
Abb. 6: Primär angelegtes Trennfugensystem in einem Plutonit /REI 91/.....	12
Abb. 7: Schermuster in Abhängigkeit der wirkenden Spannung /NAG 91/.....	13
Abb. 8: Detailbetrachtung einer Schieferungszone /BOS 91/ .....	14
Abb. 9: Fortschreitende Verwitterung granitoider Gesteine /EXK 04/	
Abb. 10: Silifizierte Kluftwandung (NAGRA).....	16
Abb. 11: Verteilung des Durchlässigkeitsbeiwertes im Schweizer Grimsel-Granit /APP 01/ .....	17
Abb. 12: Blockbild der Grundwasserströmung in einem Hartgestein und seiner Verwitterungszone /POI 97/ .....	19
Abb. 13: Mit Fluoreszenzmikroskopie dargestellte Grundwasser- strömung in verschiedenen Bereichen einer Scherzone /BOS 91/ .....	20
Abb. 14: Für die Modellbildung abstrahierte Komponenten des Hartgesteins /BOS 91/.....	22
Abb. 15: Gegenüberstellung stochastisch erzeugter Trennfugen- systeme mit den tatsächlichen Verhältnissen (nach J. W. Cosgrove /WWW 07/ ).....	23
Abb. 16: Laminare Spaltströmung nach Hagen-Poiseuille /SIL 02/ .....	25
Abb. 17: Skalenabhängigkeit beim Prozess der Dispersion /KIN 95/....	35
Abb. 18: Diffusion eines Stoffes aus der Kluft in die Gesteinsmatrix /KOL 97/ .....	36
Abb. 19: Sorptionsisotherme /OHL 00/ .....	38
Abb. 20: Radionuklidzerfallsreihen .....	40
Abb. 21: Veränderung der Wasserdichte $\rho_f$ und Viskosität $\mu$ in Abhängigkeit der Temperatur /DIE 02/, /LOE 05/ .....	43
Abb. 22: Lage des Untersuchungsgebietes.....	53
Abb. 24: Klimadiagramm der Region Krasnojarsk /WWW 05/ .....	54
Abb. 25: Verbreitung von Permafrostboden in Russland /WEI 99/ .....	55

Abb. 26: Bisher nachgewiesene maximale Ausbreitung der quartären Gletscher in Russland /SVE 04/ .....	57
Abb. 27: Geologischer Aufbau der GUS /DOL 94/ .....	58
Abb. 28: Geologische Großstrukturen der Sibirischen Tafel /DOL 94/ .....	60
Abb. 29: Geologische Karte des Nishnekansker Massives mit den Untersuchungsgebieten Itatskij und Kamennij /AND 01/ .....	31
Abb. 30: Lage und Bruchstrukturen im Umfeld des Gebietes Itatskij /AND 93/ .....	63
Abb. 31: Flusssystem des Jenniseij /WIE 99/ .....	64
Abb. 32: Modellannahmen für das zweidimensionale Detailmodell .....	69
Abb. 33: Untersuchte typische Trennfugegeometrien .....	70
Abb. 34: Tracerausbreitung für die Matrix-Variante 1 .....	72
Abb. 35: Ausbreitung eines konservativen Tracers für zwei verschiedene Matrixdurchlässigkeiten im Bereich unterschiedlich orientierter Klüfte .....	75
Abb. 36: Modellgebiet und potenzieller Endlagerbereich im Gebiet Itatskij .....	78
Abb. 37: Modellgebiet mit Topographie und modellierten Klüften /AND 93/, /AND 98/ .....	78
Abb. 38: Digitales Geländemodell mit Modellgebiet sowie einem weitgehend ungestörten Gesteinsblock als potenzielles Endlagergebiet .....	80
Abb. 39: Modellierte Grundwasserströmung innerhalb der porösen Deckschichten (a) und des geklüfteten Gesteinsbereichs (b) ..	82
Abb. 40: Gegenüberstellung der Grundwassergleichen im Locker- und Festgestein .....	83
Abb. 41: Digitales Geländemodell mit Kluftsystemen, dem dreidimensionalen Modellgebiet, dem Modellprofil sowie dem potenziellen Endlagergebiet .....	85
Abb. 42: Hydrogeologisches Strukturmodell und Kluftbenennung innerhalb des zweidimensionalen Modellgebietes .....	86
Abb. 43: Das vermaschte zweidimensionale Modell mit hydraulischen Randbedingungen .....	88
Abb. 44: Grundwasserströmung in Abhängigkeit unterschiedlicher Kluftstrukturen .....	89
Abb. 45: Modellierte Grundwasserströmungsgeschwindigkeiten innerhalb des Gesteinssystems .....	90
Abb. 46: Hydrogeologisches Strukturmodell mit der Wärmerandbedingung für die Nachbildung des natürlichen geothermischen Wärmegradienten .....	93

Abb. 47: Ausprägung unterschiedlicher Wärmefelder in Abhängigkeit der Kluftdurchlässigkeit .....	94
Abb. 48: Tracertransport in Abhängigkeit der Kluftdurchlässigkeit unter Berücksichtigung eines geothermischen Tiefengradienten von 33 °C/km.....	95
Abb. 49: Temperaturen im Bereich der eingelagerten Abfallbehälter ...	96
Abb. 50: Hydrogeologisches Strukturmodell mit Wärmerandbedingung für die Neubildung des geothermischen Wärmegradienten und der beiden durch den radioaktiven Abfall erzeugten Wärmequellen .....	97
Abb. 51: Schematische Darstellung des Modellaufbaus für die vergleichende Testrechnung .....	105
Abb. 52: Modellergebnisse der zwischen den Programmen r <sup>3</sup> t und FEFLOW durchgeführten vergleichenden Testrechnung.....	108
Abb. 53: Eingabemaske des Dateikonverters nach S. Jahns .....	110
Abb. 54: Kleinräumige Stoffausbreitungsrechnung für verschiedene Kluftanordnungen und die poröse Deckschicht.....	111

## Tabellen

Tab. 1: Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität des Wassers in Abhängigkeit seiner Temperatur /WWW 08/.....	42
Tab. 2: Spezifisches Wasservolumen in Abhängigkeit seiner Temperatur /HYD 08/.....	43
Tab. 3: Anwendungsmöglichkeiten verschieden dimensionierter diskreter Finite-Elemente /WAS 02/.....	47
Tab. 4: Tiefenzonierung und Durchlässigkeitsbeiwerte der geologischen Einheiten im Granitoid des Nishnekanser Graniotoidmassivs /ZIE 04/, /WAL 05/.....	65
Tab. 5: Parametrisierung der unterschiedlichen Matrix-Varianten, für die jeweils der Einfluss aller drei Kluftgeometrien untersucht werden.....	70
Tab. 6: Durchlässigkeitsbeiwerte der im 3d-Modell genutzten Gesteinsschichten.....	78
Tab. 7: Modelleingabe für die Durchlässigkeit der verschiedenen hydrogeologischen Strukturen.....	85
Tab. 8: Modelleingabe der wärmespezifische Parameter von Wasser und Festgestein /DIE 04/.....	91
Tab. 9: Zeitpunkt des ersten Traceraustritts in Jahren für eine Kluftdurchlässigkeit von $7 \cdot 10^{-5}$ m/s.....	94
Tab. 10: Eingangsdaten für die Programme r <sup>3</sup> t und FEFLOW.....	100
Tab. 11: Halbwertszeit der berücksichtigten Radionuklide.....	106